N° d'ordre 59 Année 1962

THÈSE

présentée

A LA FACULTÉ DES SCIENCES
DE L'UNIVERSITÉ DE LYON

pour obtenir

Le grade de DOCTEUR DE TROISIÈME CYCLE
(Physique Supérieure)

par

Hafez KOBEISSE
Licencié ès Sciences

SUJET :

Tracé des fonctions d'onde des états $X^2\Sigma_g^+$ et $B^2\Sigma_u^+$ de la molécule N_2^+

Soutenue le 23 Juin 1962, devant la Commission d'Examen.

M. J. JANIN	Président
MM. R. GRANDMONTAGNE A. LAFORGUE	Examinateurs

LYON
Imprimerie BOSC Frères
42, quai Gailleton, 42
—
1962

N° d'ordre 59 Année 1962

THÈSE

présentée

A LA FACULTÉ DES SCIENCES
DE L'UNIVERSITÉ DE LYON

pour obtenir

Le grade de DOCTEUR DE TROISIÈME CYCLE
(Physique Supérieure)

par

Hafez KOBEISSE
Licencié ès Sciences

R. UNIV. BIBLIOTHEEK LEIDEN

SUJET :

Tracé des fonctions d'onde des états $X^2\Sigma_g^+$ et $B^2\Sigma_u^+$ de la molécule N_2^+

Soutenue le 23 Juin 1962, devant la Commission d'Examen.

M. J. JANIN	Président
MM. R. GRANDMONTAGNE A. LAFORGUE	Examinateurs

LYON
Imprimerie BOSC Frères
42, quai Gailleton, 42
—
1962

Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41550012_0008

UNIVERSITE DE LYON -- FACULTE DES SCIENCES

Doyens honoraires

MM. LONGCHAMBON, DOUIN, MOUSSA

Professeurs honoraires

MM. LOCQUIN, de LARAMBERGUE, DOEUVRE, SOLLAUD, MENTZER, MOUSSA, JAFFARD

Doyen

M. GAUTHIER H.

Assesseur

M. BRACONNIER

Professeurs

MM. LONGCHAMBON	Minéralogie
DEJARDIN	Physique générale
DOUIN	Botanique
EYRAUD Henri	Calcul différentiel et Intégral
COURTY	Chimie-physique
PRETTRE	Chimie industrielle
KUHNER	Microbiologie et Mycologie
MALECOT	Mécanique rationnelle et appliquée
PARIS	Chimie minérale
AUMERAS	Chimie
COLONGE	Chimie organique
FLANDRIN	Géologie appliquée
JANIN	Physique expérimentale
BERNARD	Physique industrielle
DUFAY Jean	Astronomie
NIGON	Zoologie expérimentale
GAUTHIER Henri	Géologie générale
VIRET	Géologie générale
WAUTIER	Zoologie
CHOPIN	Chimie biologique
CUEILLERON	Chimie
BRACONNIER	Méthodes Mathématiques de la Physique
EYRAUD Charles	Chimie-physique appliquée
SARAZIN	Physique nucléaire
PERES	Physiologie
MESNARD	Electronique
GRANDMONTAGNE	Physique
BOIDIN	Botanique
BOUTILLIER	Minéralogie
LAFOUCRIERE	Physique nucléaire
DREUX	Chimie organique
TEICHNER	Chimie industrielle
PAVANS DE CECCATTY	Zoologie

Professeurs sans chaire

MM.	GAUME	Physique
	MERLIN	Chimie minérale
	PHILBERT	Physique nucléaire
	COHEN-ADAD	Chimie

Maîtres de Conférences

MM.	DEPRAZ	Physique nucléaire
	FERON	Mathématiques
	LAFORGUE	Physique
	BERSILLON	Physiologie végétale S.P.C.N.
	DAVID Louis	Géologie générale
	GAUTHIER Jean	Chimie
	LEGAY	Zoologie expérimentale S.P.C.N.
	UZAN	Physique S.P.C.N.
	CHENEVOY	Géologie appliquée
Mlle	MAITROT	Physique
	CHANEL	Psychophysiologie
	ASCH	Physique
	DUFAY Maurice	Physique
	GINET	Zoologie
	MAURY	Mathématiques
	MICHEL	Minéralogie
Mme	ERICSON	Physique générale
	GEVIN	Géologie générale
	PONASSE	Mathématiques
	MARTEL	Mécanique
	CHERY	Physique
	LEFEBVRE	Mathématiques
	d'INCAN	Physique
	PERNET	Mathématiques
Mlle	GAUTHERON	Chimie biologique
	BERGEON	Physique
	MATHIEU	Mécanique des fluides
	LUBET	Physiologie

Maîtres de Conférences adjoints

MM.	PIERRON	Chimie
	LEMONDE	Physique

Secrétaire Principal honoraire

M. ROUX

Secrétaire Principal

M. BURNET

AVANT - PROPOS

Ce travail a été entièrement réalisé dans les laboratoires de l'Institut de Physique Générale de l'Université de Lyon. Je veux tout d'abord prier Monsieur le Professeur DEJARDIN, Directeur de l'Institut, de bien vouloir accepter mes remerciements pour m'avoir permis d'effectuer ce travail dans ses laboratoires.

Je remercie vivement Monsieur le Professeur JANIN pour avoir bien voulu présider mon jury de thèse, et pour le support matériel et moral qu'il m'a apporté.

Je suis heureux d'exprimer ici mes remerciements à mon Maître, Monsieur le Professeur GRANDMONTAGNE. Il s'est intéressé de très près à ces recherches et m'a toujours suivi dans mon travail avec bienveillance. Qu'il me soit permis de l'assurer de mes sentiments de vive gratitude.

Je remercie Monsieur LAFORGUE d'avoir accepté de faire partie du jury.

Je tiens, enfin, à remercier ceux de mes camarades auprès de qui j'ai souvent trouvé une aide spontanée.

I N T R O D U C T I O N

Pour une molécule diatomique les fonctions d'onde de vibration appartenant à un état électronique donné sont des fonctions d'une seule variable $x = r - r_e$, où r est la distance internucléaire, r_e étant sa valeur à l'équilibre.

Ces fonctions d'onde Ψ_v sont les solutions de l'équation de Schrödinger :

$$(1) \qquad \frac{d^2\Psi_v}{dx^2} + \frac{8\pi^2 c\mu}{h}(T_v - U)\Psi_v = 0$$

où :

- v est le nombre quantique de vibrations.
- U est le potentiel de l'état électronique, exprimé en kaysers.
- T_v est le terme spectral du niveau de vibration, exprimé en kaysers.
- μ est la masse réduite de la molécule.
- c est la vitesse de la lumière.
- h est la constante de Plank.

Nous nous sommes proposés de chercher les solutions de l'équation (1) à l'aide de la machine analogique pour les deux états électroniques $B^2\Sigma_u^+$ et $X^2\Sigma_g^+$ de la molécule N_2^+ et pour les valeurs de v allant de 0 à 20.

Pour que la machine analogique fournisse la solution cherchée de l'équation (1), il est nécessaire de lui imposer trois valeurs initiales numériquement connues à l'avance : Ψ_o , $(\frac{d\Psi}{dx})_o$, $(\frac{d^2\Psi}{dx^2})_o$, pour une valeur x_o qui doit, elle

aussi, être connue. La méthode de calcul de ces valeurs sera exposée dans le chapitre I.

A partir de ces valeurs initiales, la machine analogique donne la solution graphique de l'équation (1) pour $x > x_o$. Nous avons repris, en la perfectionnant, la méthode d'enregistrement élaborée par R. Eido [4]. La théorie et la technique de cet enregistrement feront l'objet du chapitre II.

Pour compléter le tracé de la fonction d'onde , il faut tracer la branche dite gauche de Ψ, c'est-à-dire celle qui correspond à $x < x_o$. La méthode utilisée pour le tracé de cette branche sera exposée et discutée dans le chapitre III. Ce chapitre contiendra aussi le tableau des résultats. Les deux derniers chapitres contiennent, l'un une nouvelle méthode pour le calcul numérique des valeurs initiales, l'autre une première exploitation des résultats qui consiste à vérifier la loi de Jarmain sur les r-centroïds.

Les valeurs numériques dont nous avons besoin sont (en unités C.G.S.) :

- vitesse de la lumière dans le vide $c = 2,99792 \cdot 10^{10}$
- charge électronique de l'électron $\varepsilon = 4,8029 \cdot 10^{-10}$
- constante de Plank $h = 6,6253 \cdot 10^{-27}$
- Nombre d'Avogadro $N = 6,0248 \cdot 10^{24}$
- $\frac{8\pi^2 c \mu}{h}$ pour la molécule N_2^+ $A = 4,1532 \cdot 10^{15}$

Pour les deux états électroniques, nous avons :

	$B^2\Sigma_u^+$	$x^2\Sigma_g^+$	
ω_e =	2419,84	2207,19	Kaysers
$\omega_e x_e$ =	16,136	23,190	
r_e =	1,1162	1,075	Å
a =	3,1033	2,58865	

C H A P I T R E I

-:-:-:-:-:-:-:-:-

VALEURS INITIALES

1. - Point initial. - R. Grandmontagne [9] a choisi l'un des points d'inflexion terminaux pour lesquels nous avons :

$\frac{d^2 \psi_v}{dx^2} = 0$ sans que $\psi_v = 0$.

L'équation de Schrödinger :

$$(1) \qquad \frac{d^2 \psi_v}{dx^2} + A(T_v - U)\psi_v = 0 \quad (\text{où } A = \frac{8\pi^2 c\mu}{h})$$

devient $T_v - U = 0$ lorsque : $\frac{d^2 \psi_v}{dx^2} = 0$.

Les abscisses des points d'inflexion terminaux peuvent se repérer sur la courbe de potentiel. Ces abscisses sont celles des points d'intersection de la courbe de potentiel avec l'horizontale T_v (Terme spectral correspondant au nombre quantique v de vibration).

La valeur initiale ψ_o de ψ peut être arbitraire, car cela revient à changer l'échelle des ordonnées dans la représentation graphique de ψ.

2. Courbes de potentiel. - Les courbes de potentiel adoptées dans ce travail sont celles obtenues après correction par R. Grandmontagne et R. Eido [10] et [3] .

Il est à noter que pour $X^2 \Sigma_g^+$ aussi bien que pour

$B^2\Sigma_u^+$, la branche AO de la courbe de potentiel correspondante aux abscisses négatives, suit sensiblement la loi de Morse :

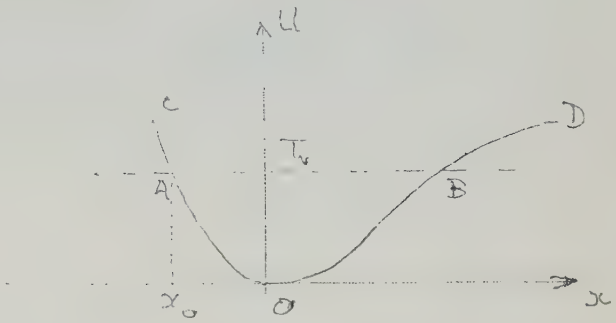


Fig. 1

$$U = D\left(1 - e^{-ax}\right)^2$$

où D est l'énergie de dissociation,

$$a^2 = \omega_e x_e \times \frac{\mu c}{2\pi^2 h}$$

Pour cette raison, le point d'inflexion terminal gauche est pris comme point initial.

3. - Calcul de x_o. - Morse [13] a démontré qu'en prenant $U = D\left(1 - e^{-ax}\right)^2$, l'équation (1) a pour solution :

$$\Psi_v = N_v\, e^{-z/2}\, z^{b/2}\, L_v^b(z)$$

où v est le nombre quantique de vibration. N_v est un facteur de normalisation.

$$z = ke^{-ax}$$

$$b = k - 2v - 1$$

$$k = \frac{1}{x_e}$$

$L_v^b(z)$ = polynôme de Laguerre généralisé, solution de l'équation :

$$(2) \qquad z\frac{d^2L}{dz^2} + (b + 1 - z)\frac{dL}{dz} + vL = 0$$

Cherchons $\frac{d\Psi}{d^2}$ et $\frac{d^2\Psi}{dx^2}$

$$\frac{d\Psi}{dx} = \frac{d\Psi}{dz}\cdot\frac{dz}{dx} = N\left[\left(bz^{b/2-1} - z^{b/2}\right)\frac{L}{2} + z^{b/2}L'\right](-az\, e^{-z/2})$$

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = N\left[\left(\frac{(b-z)^2}{4z} - \frac{1}{2}\right) L + (b+1-z)L' + zL''\right] a^2 z^{\frac{b}{2}+1} e^{-z/2}$$

avec $L' = \frac{dL}{dz}$, $L'' = \frac{d^2L}{dz^2}$

Pour un point d'inflexion, nous avons $\frac{d^2\Psi}{dx^2} = 0$, c'est-à-dire :

$$(3) \qquad zL'' + (b+1-z)L' + \frac{(b-z)^2}{4z} - \frac{1}{2} L = 0$$

Pour que L vérifie à la fois les équations (2) et (3), il faut que :

$$\frac{(b-z)^2}{4z} - \frac{1}{2} = v \qquad \text{ou } L = 0$$

La condition L = 0 est à rejeter puisqu'elle correspond à $\Psi = 0$, c'est-à-dire aux intersections de la courbe avec l'axe des x. Nous cherchons justement les points d'inflexion qui ne sont pas sur cet axe et plus spécialement celui de gauche.

Nous retenons donc la première condition qui s'écrit :

$$z^2 - 2z(b + 2v + 1) + b^2 = 0$$

ou $$z^2 - 2Kz + b^2 = 0 \qquad \text{avec} \quad K = b + 2v + 1$$

Les racines de cette équation existent tant que le discriminent $\Delta = K^2 - b^2$ est positif.

$$K^2 - b^2 = (2v + 1)(K - 2v - 1)$$

Les racines existent quand :

$$K \geqslant 2v + 1$$

c'est-à-dire quand $v \leqslant 51$ pour l'état $B\Sigma$

$v \leqslant 68$ pour l'état $X\Sigma$

ce qui dépasse largement notre domaine qui est limité à v = 20 pour les deux états.

Parmi ces deux racines, c'est la plus grande qui correspond au point initial P, parce que $z = Ke^{-ax}$ varie au sens contraire de x. Nous avons donc :

$$z_o = K + \sqrt{K^2 - b^2}$$

$$x_o = - \frac{1}{a \log e} \times \log\left(\frac{z_o}{K}\right)$$

4. - Calcul de $\left(\frac{d\Psi}{dx}\right)_o$. - Nous avons trouvé plus haut :

$$\frac{d\Psi}{dx} = N\left(- aze^{-z/2}\right)\left[\left(bz^{\frac{b}{2}-1} - z^{b/2}\right)\frac{L}{2} + z^{b/2}L'\right]$$

Pour faire disparaître le facteur N, nous formons :

$$\frac{1}{\Psi}\ \frac{d\Psi}{dx} = a\left[\frac{z-b}{2} - z\,\frac{L'}{L}\right]$$

D'où, pour le point initial P, nous avons :

$$\left(\frac{1}{\Psi}\ \frac{d\Psi}{dx}\right)_o = a\left[\frac{1}{2}\left(2v + 1 + \sqrt{K^2-b^2}\right) - \left(K + \sqrt{K^2-b^2}\right)\frac{L'}{L}\right]$$

Ce qui nous donne pour chaque nombre quantique v la valeur $\left(\frac{d\Psi}{dx}\right)_o$ en fonction de Ψ_o.

La grande difficulté de calcul de $\frac{\Psi'_o}{\Psi_o}$ est le calcul du polynôme de Laguerre L_v^b. La difficulté provient du nombre élevé des "chiffres perdus" en faisant la somme des termes du polynôme. Lorsque son degré v dépasse 10, la précision requise sur le calcul de chaque terme devient prohibitive.

Pour cette raison et vu l'ordre de grandeur de z qui varie entre 100 et 200, la valeur de b étant toujours de plusieurs dizaines, un calcul direct de ces polynômes reste interdit aux calculateurs électroniques dans les conditions ordinaires (cf. Chapitre IV).

5. - Calcul des polynômes de Laguerre. - R. Grandmontagne [7] a développé une méthode de calcul du polynôme de Laguerre qui permet d'obtenir la valeur de ce polynôme avec une "perte de chiffres" négligeable, et qu'on peut faire à l'aide des tables de logarithmes usuelles.

Cette méthode consiste à faire le changement de variable $z = A + y$ avec $A = K - v - 1$. Le polynôme :

$$L = (-1)^v \, v! \, L_v^b(z) = z^v - A\binom{v}{1} z^{v-1} + A(A-1)\binom{v}{2} z^{v-2} + \ldots$$

devient :

$$L = \sum_{j=\left[\frac{v}{2}\right]+1}^{v} (-A)^{v-j} \left[y^{2j-v} \binom{v}{2j-v} \alpha_{v-j} + y^{2j-v-1} \binom{v}{2j-v-1} \beta_{v-j+1} + \ldots \right]$$

avec :

$\left[\frac{v}{2}\right]$ = partie entière de $\frac{v}{2}$.

En posant : $v - j = i$, ou $2j - v = v - 2i$, nous obtenons :

$$L = \sum_{i=0}^{[v/2]} (-A)^i \left[y^{v-2i} \binom{v}{v-2i} \alpha_i + y^{v-2i-1} \binom{v}{v-2i-1} \beta_{i+1} + y^{v-2i-2} \binom{v}{v-2i-2} \gamma_{i+2} + \ldots \right]$$

Les termes $i = 0$ sont donnée par $L = y^v$ (puisque $\alpha_o = 1$)

Les termes $i = 1$ sont donnée par

$$1 = - Av \, ! \sum_{h=0}^{v-2} \frac{y^h}{h!} \cdot \frac{1}{v-h}$$

6. - Résultats. - Dans le tableau suivant nous trouvons pour chaque état électronique et pour chaque niveau étudié la valeur

de z_o et celle de $\frac{\psi'_o}{\psi_o}$. Pour l'état $B^2\Sigma_u^+$, le calcul a été fait pour v allant de 0 à 20. Pour l'état $X^2\Sigma_g^+$ nous nous sommes limités à v = 19.

Tableau I

v	$B^2\Sigma_u^+$		$X^2\Sigma_g^+$	
	z_o	ψ'_o/ψ_o	z_o	ψ'_o/ψ_o
0	118,762	23,91	153,293	22,979
1	129,194	28,264	165,273	27,097
2	136,266	30,868	173,428	29,551
3	141,928	32,783	179,980	31,383
4	146,747	34,369	185,584	32,858
5	150,985	35,694	190,525	34,132
6	154,792	36,850	194,984	35,233
7	158,255	37,875	199,061	36,250
8	161,439	38,795	202,826	37,000
9	164,388	39,750	206,330	37,517
10	167,136	40,436	209,611	38,550
11	169,706	41,280	212,698	39,250
12	172,121	41,750	215,612	39,762
13	174,395	42,425	218,375	40,640
14	176,542	42,877	221,000	41,122
15	178,573	43,375	223,498	41,687
16	180,498	44,070	225,882	42,505
17	182,324	44,400	228,160	43,305
18	184,058	44,800	230,340	43,875
19	185,706	45,325	232,429	44,737
20	187,273	45,637		

C H A P I T R E II

-:-:-:-:-:-:-:-:-

ENREGISTREMENT GRAPHIQUE DES FONCTIONS D'ONDE A L'AIDE DE LA MACHINE ANALOGIQUE

1. - L'équation à résoudre. - Nous reprenons l'équation de Schrödinger :

$$(1) \qquad \frac{d^2\psi}{dx^2} + A(T - U)\psi = 0$$

dans laquelle :

$$A = \frac{8\pi^2 c\mu}{h} = 4{,}1532 \cdot 10^{15}$$

pour la molécule $N_{2\ i}$ $(T - U)$ est évalué en Kaysers. Le potentiel U est fourni sous forme de courbe.

Nous posons pour la machine [4] $y(\text{volts}) = K\psi$, K étant une constante arbitraire. L'équation devient :

$$(1') \qquad \frac{d^2y}{dx^2} + 4{,}1532 \cdot 10^{15}\,(T - U)y = 0$$

La machine peut donner :

$$\dot{y} = \frac{dy}{dt}, \quad \text{et} \quad \ddot{y} = \frac{d^2y}{dt^2}$$

Nous écrivons l'équation (inconnue) de la courbe de potentiel sous la forme :

$$U' \text{ (cm)} = f(\gamma)$$

γ étant l'abscisse en cm du graphique.

Cette courbe U' est montée sur le suiveur de courbe qui délivre à la sortie une tension proportionnelle aux ordonnées. Le point de potentiel zéro est réglé de manière à obtenir à la sortie :

$$(T" - U")_{volts} = \varphi(\gamma)$$

où T" représente le terme spectral évalué en volts-machine et U" le potentiel ayant la même unité.

Un deuxième accessoire, "le multiplieur", est connecté pour obtenir le produit (T" - U") . y

Nous posons : $\frac{d\gamma}{dt} = u$ cm/sec. , u étant la vitesse de déroulement de la courbe de potentiel. Nous avons :

$$(4) \qquad \frac{d^2y}{d\gamma^2} = \frac{d^2y}{dt^2} \cdot \left(\frac{dt}{d\gamma}\right)^2 = \ddot{y} \cdot \frac{1}{u^2}$$

Soit α le nombre d'angströms par centimètre d'abscisse du graphique du potentiel ; $\frac{x}{\gamma} = \frac{\alpha}{10^8}$. Ce qui donne :

$$(5) \qquad \frac{d^2y}{dx^2} = \frac{d^2y}{d\gamma^2} \cdot \left(\frac{d\gamma}{dx}\right)^2 = \frac{10^{16}}{\alpha^2} \cdot \frac{d^2y}{d\gamma^2}$$

Des relations (4) et (5) nous tirons :

$$\frac{d^2y}{dx^2} = \frac{10^{16}}{\alpha^2} \cdot \frac{1}{u^2} \cdot \ddot{y}$$

Pour des raisons purement techniques nous avons pris :

$u = 1$ cm/sec. et $\alpha = 10^{-2}$ (Cf, paragraphe 3).

D'où : $$\frac{d^2\gamma}{dx^2} = 10^{20} \cdot \ddot{y}$$

Il reste à choisir l'échelle de U. Nous prenons :

200 Kaysers = 1 cm

$$(T-U)_{Kaysers} = (T'-U')_{cm} \cdot 2000$$

$$(T-U)_{Kaysers} = (T"-U")_{volts} \cdot 300\beta$$

où β est un nombre à déterminer.

Les deux dernières relations donnent : $1^{cm} = \frac{20}{3}$ volts, ou : 100 (volts) = 15β (cm).

En prenant pour zéro le niveau v = 10, c'est-à-dire l'ordonnée $10^{cm},8$, nous avons trouvé 63 volts au minimum de la courbe de potentiel (état $B\Sigma$).

Pour obtenir 100 volts, il faudrait :

$$\frac{10,8 \cdot 100}{63} = 17,143 \text{ cm.}$$

D'où :

$$17,143 = 15\beta \quad \text{et} \quad \beta = 1,143$$

En tenant compte du changement de la variable, l'équation (1') devient :

$$10^{20} \cdot \ddot{y} + 4,1532 \cdot 10^{5} \cdot 300 \cdot 1,143(T'' - U'')y = 0$$

$$\ddot{y} + 1,4241\,(T'' - U'')y = 0 \qquad (1'')$$

C'est sous cette forme que nous donnons l'équation à la machine analogique pour la résoudre.

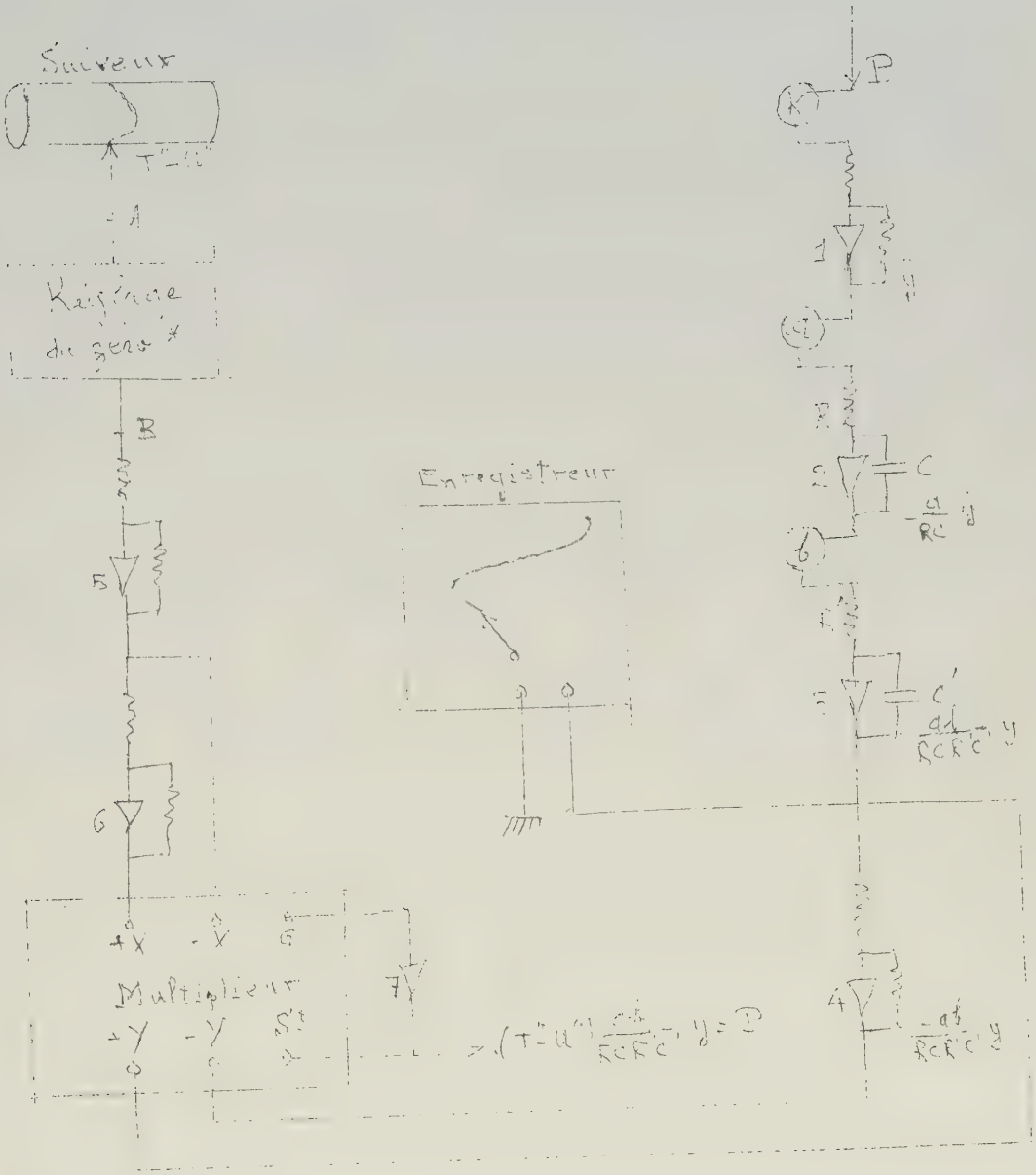
2. - Schéma du montage. -

Les amplificateurs 2 et 3 sont des intégrateurs, les autres sont des simples changeurs de signe.

Le multiplieur reçoit d'un côté $X = -(T'' - U'')$, de l'autre $Y = \frac{-ab}{RCR'C'}, y$ y et donne à la sortie le produit $P = X \cdot Y$ qui est injecté dans le potentiomètre K.

La machine analogique est un ensemble du type OME - P2 construit par la "Société d'Electronique et d'Automatisme". Il comprend deux parties : une armoire d'alimentation et le calculateur proprement dit. Ce calculateur renferme un panneau d'affichage de 60 potentiomètres répartis en 6 groupes de 10 potentiomètres et six tiroirs amplificateurs et fonctionnels dont chacun contient quatre amplificateurs.

Le multiplieur est du type 3 MEP 5 construit également par la Société d'Electronique et d'Automatisme.



→ est un amplificateur

⊙ est un potentiomètre.

Fig. 2

(*) Cf Fig. 2'

Le suiveur optique utilisé est l'enregistreur S.E.A. type 6 E.S.M.5. Il permet la représentation graphique de la variation simultanée de deux grandeurs par enregistrement de la courbe correspondante. La courbe $y = f(x)$ est tracée en coordonnées cartésiennes.

Un tambour fait défiler la feuille d'enregistrement devant un style se déplaçant parallèlement aux génératrices du tambour. La rotation du tambour et le déplacement du style sont asservis respectivement aux variations des grandeurs x et y.

Inversement, une courbe $y = f(x)$ étant tracée, on peut remplacer le style par un "suiveur optique" qui peut lire les valeurs de y. Les valeurs de x croissent régulièrement grâce à l'entraînement du tambour à une vitesse constante u.

Dans notre travail, l'Enregistreur a servi uniquement en suiveur optique pour "lire" les courbes du potentiel tracées des états $B^2\Sigma_u^+$ et $X^2\Sigma_g^+$.

3. - Echelle des abscisses. - Dans le paragraphe 1 nous avons signalé que la courbe de potentiel est tracée avec 1 cm d'abscisse pour 10^{-2} Å. Pour obtenir une échelle convenable des abscisses sur les courbes des fonctions d'onde enregistrées, il est indispensable d'avoir un rapport simple entre la vitesse u de la rotation du tambour (du suiveur optique) et la vitesse v de l'enregistreur.

Le choix de cette dernière est limité. Nous l'avons prise égale à 2 mm/sec. pour avoir un tracé de la fonction d'onde aussi étalé que possible sans que la vitesse donne lieu à des irrégularités d'enregistrement. Il reste à ajuster la vitesse u du suiveur optique, afin d'abtenir un rapport simple entre l'unité d'abscisse de la courbe de potentiel et celle de la fonction d'onde. Nous avons pris u = 1 cm/sec. Un stroboscope a été monté sur l'arbre du tambour pour maintenir u

constamment égale à 1 cm/sec. Ce qui fait que l'unité d'abscisse sur les courbes enregistrées est telle qu'un centimètre vaut $5.\ 10^{-2}$ Å.

4. - Enregistrement des courbes.-

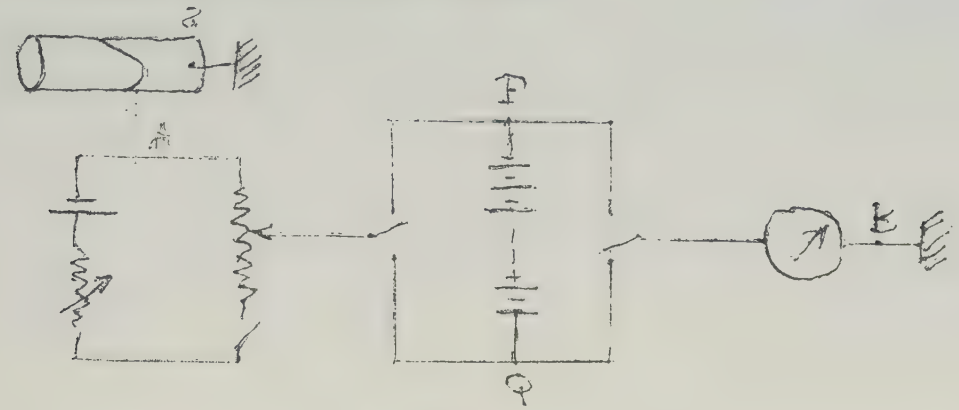


Fig. 2

Pour le tracé de chaque fonction d'onde, nous effectuons les manoeuvres suivantes :

a) Nous affichons la valeur y_o = 40 volts. Cette valeur est prise la même pour toutes les fonctions d'onde.

b) Nous affichons la valeur $\dot{y}_o$ de la fonction d'onde à enregistrer.

c) Nous fixons le zéro du voltmètre pour U = T_v. Pour y arriver, nous utilisons à la sortie du suiveur le montage "Réglage du zéro" indiqué dans la figure (2) et détaillé ci-contre. Nous pouvons obtenir un courant nul en B en faisant changer le nombre de piles entre PQ, et en ajustant les potentiomètres, et, quand il est nécessaire, en intervertissant les connections des bornes P et Q.

d) Nous amenons le suiveur optique au point C (fig. 1) pour lequel : U $\geqslant$ T_v.

e) La machine analogique ayant y_o et $\dot{y}_o$ en "Mémoire", nous mettons l'enregistreur en marche. Le style décrit une droite parallèle à l'axe des abscisses. Cette droite a pour cote ψ_o.

f) Nous mettons le porteur de la courbe de potentiel en marche. Le suiveur optique suit la courbe de potentiel tracée. (T - U) diminue en valeur absolue et s'approche de zéro.

g) A l'instant même où le suiveur optique arrive au point A (fig. 1) pour lequel T = U, nous mettons la machine en "Résolution". Le style de l'enregistreur commence à tracer la fonction d'onde.

Nous avons utilisé deux enregistreurs, en même temps, réglés à la même vitesse. Le premier est un "Graphispot" construit par "Sefram" portant un style à encre assurant l'inscription en coordonnées rectilignes avec une précision de $\pm$ 2 mm.

Le deuxième est un "Enregistreur Script" construit par "Chauvin Arnoux". Il est muni d'un dispositif d'inscription sèche sur papier métallisé qui permet un enregistrement à coordonnées rectilignes et rectangulaires.

Les courbes obtenues sur l'un et l'autre enregistreurs sont absolument semblables.

5. - Convergence de la partie terminale de la fonction d'onde.- La théorie nous dit que Ψ_v doit tendre vers zéro quand x est infini [15]. Or le plus souvent la courbe Ψ_v obtenue par le processus précédent se termine par une branche parabolique au lieu de l'asymptote attendue sur Ox. Ceci est dû à ce que les valeurs initiales sont "affichées" en utilisant le potentiomètre étalon donnant une précision de 10^{-4}. Ce qui est, physiquement parlant, une bonne précision ; mais qui, mathématiquement, est insuffisant pour garantir la convergence.

Nous sommes alors amenés à remplacer le terme spectral T_v par une valeur voisine $T_v - \Delta T_v$ pour obtenir la convergence de la branche terminale de Ψ_v. Nous prenons ΔT_v de plus en

plus grand pour accentuer la convergence autant que possible.

Nous obtenons parfois des courbes ψ_v qui répondent presque parfaitement à la théorie. Dans la figure 10 nous en trouverons un exemple. Mais la finesse de l'ajustage n'est pas toujours possible. Dans ce dernier cas, nous cherchons à obtenir un enregistrement ψ_v^I (correspondant) $T_v^I = T_v - \Delta T_v$) avec la meilleure convergence possible.

Nous ajoutons à T_v^I un nouvel accroissement $\Delta^2 T_v$. La partie terminale de la nouvelle courbe coupe l'axe des abscisses. Nous nous arrangeons pour prendre $\Delta^2 T_v$ aussi petit que possible et nous enregistrons la courbe ψ_v^{II} correspondante à $T_v^{II} = T_v - \Delta T_v + \Delta^2 T_v$. (La partie terminale de ψ_v^{II} coupe l'axe des abscisses). $\Delta^2 T_v$ n'a jamais dépassé le millimètre sur le graphique de la courbe de potentiel, c'est-à-dire le dixième de volt.

Les deux courbes de la figure 3 représentent les deux enregistrements ψ_v^I et ψ_v^{II} de la même fonction d'onde ψ_v. Nous remarquons que ces deux courbes coïncident parfaitement jusqu'au dernier zéro (à partir du point initial). Les parties terminales de ψ_v^I et ψ_v^{II} encadrent la "bonne" partie terminale de ψ_v qu'on peut tracer à la main avec une certitude suffisante.

Dans le tableau II, nous trouvons les valeurs de T_v, T_v^I et T_v^{II} correspondant à chaque fonction d'onde ψ_v de l'état $X^2\Sigma_g^+$. Le tableau II' contient les valeurs des mêmes éléments pour les fonctions d'onde de l'état $B^2\Sigma_u^+$. Tous ces termes sont exprimés en volts.

TABLEAU II

v	T_v	T_v^I	T_v^{II}
0	0,55	0,35	0,4
1	1,64	1,50	1,64
2	2,7o	2,60	2,65
3	3,76	3,70	3,75
4	4,80	4,66	4,70
5	5,82	5,65	5,70
6	6,83	6,65	6,70
7	7,81	7,60	-
8	8,78	8,55	8,60
9	9,74	9,55	9,60
10	10,67	10,40	10,45
11	11,59	11,42	-
12	12,49	12,40	-
13	13,37	13,30	-
14	14,24	14,13	-
15	15,08	15,0	15,05
16	15,91	15,78	15,80
17	16,72	16,70	-
18	17,51	17,53	-
19	18,28	18,30	18,35
20			

TABLEAU II'

v	T_v	T_v^I	T_v^{II}
0	0,60	0,40	0,50
1	1,77	1,60	1,65
2	2,95	2,70	2,80
3	4,08	3,95	4,0
4	5,17	5,1	5,2
5	6,24	6,0	6,2
6	7,26	7,02	7,08
7	8,23	8,0	8,05
8	9,15	8,98	9,0
9	10,02	9,95	10,0
10	10,81	10,70	10,80
11	11,55	11,55	11,58
12	12,24	12,0	12,10
13	12,88	12,8	-
14	13,48	13,35	13,4
15	14,04	13,95	14,0
16	14,52	14,35	14,42
17	15,08	15,0	15,05
18	15,56	15,43	15,45
19	16,03	16,0	16,05
20	16,46	16,45	16,50

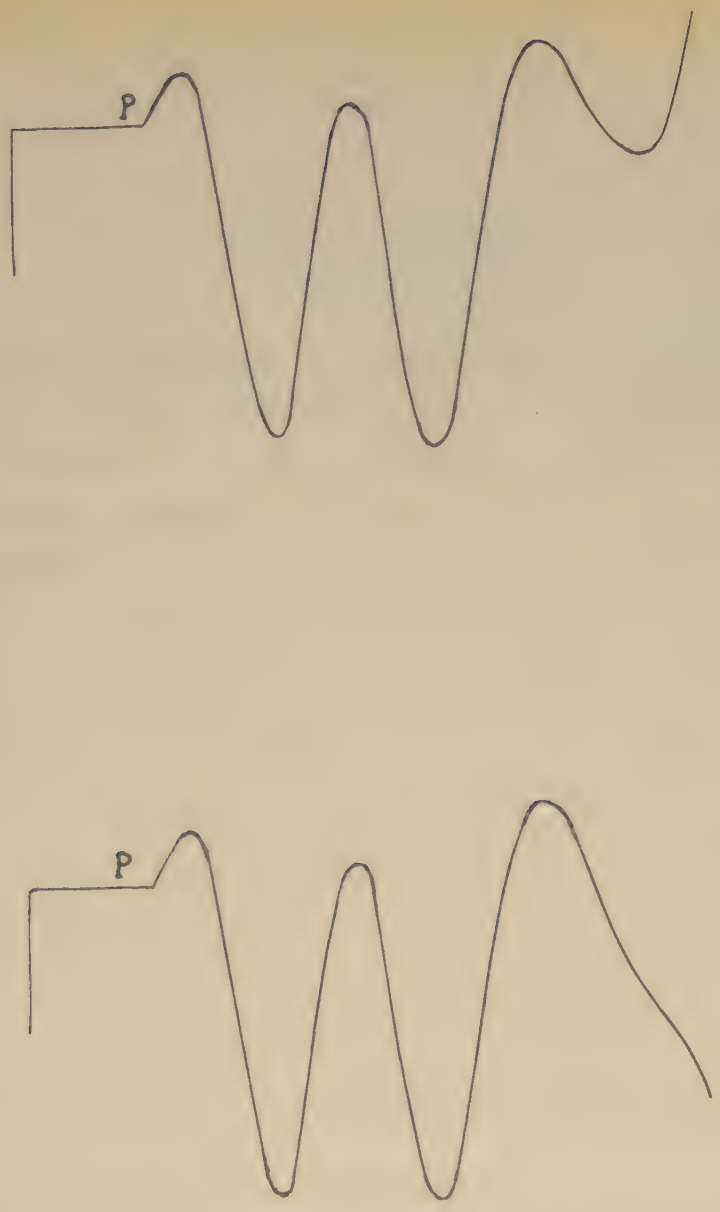


FIG. 3 Enregistrements de la fonction d'onde du niveau v=4 de l'etat $X^2\Sigma_g^+$

Le plus haut est obtenu avec T = 4,66 v. ;

le plus bas avec T = 4,70 volts

C H A P I T R E III

-:-:-:-:-:-:-:-:-

BRANCHE GAUCHE

1. - Méthode employée. - Pour obtenir la fonction d'onde complète, il reste à tracer la "branche gauche" de Ψ , c'est-à-dire la partie correspondante à $-\infty < x < x_o$ (x_o étant l'abscisse du point d'inflexion gauche P_v utilisé dans le chapitre I).

La méthode B.W.K. [15] et [16] de la résolution de l'équation de Schrödinger nous dit que cette branche est exponentielle. Il faut donc pouvoir déterminer un point $B(x_1 , \Psi_1)$ de cette branche, et il sera par la suite facile de compléter la fonction d'onde comme dans la figure ci-contre.

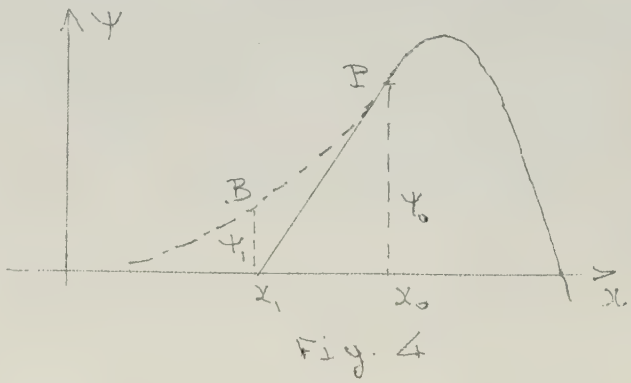


Fig. 4

Trait plein : courbe enregistrée
En pointillé: branche à tracer

2. - Choix de x_1. - Menons la tangente en P à la courbe Ψ. L'équation de cette droite est :

$$\Psi - \Psi_o = \Psi'_o(x - x_o)$$

Cette tangente coupe l'axe des x au point x_1 donné par :

$$- \Psi_o = \Psi_o'(x_1 - x_o)$$

ou

$$x_1 = x_o - \frac{\Psi_o}{\Psi_o'}$$

Cette relation a pour avantage d'être indépendante du

facteur de normalisation de la courbe . Le calcul de x_1 est immédiat puisque x_o et $\frac{\psi_o}{\psi'_o}$ ont été calculés dans le chapitre I.

D'autre part, toute abscisse $x = x_o - \alpha \frac{\psi_o}{\psi'_o}$, où α est un nombre positif quelconque présente le même avantage que x_1 et peut par conséquent être choisie comme abscisse du point cherché B.

Nous préférons prendre $\alpha = 1$, puisque d'une part le point B d'abscisse $x_1 = x_o - \frac{\psi_o}{\psi'_o}$ est assez bas pour être dans la région "coudée" de la branche gauche sans être très proche de l'axe des abscisses. D'autre part, x_1 est déterminé graphiquement en traçant la tangente en P à la courbe enregistrée sans recourir à une origine des abscisses.

3. - Calcul de ψ_1. - Nous avons vu dans le chapitre I que la branche gauche de ψ obéit à la loi de Morse, c'est-à-dire que pour cette branche nous avons :

$$\psi_v = N_v \, e^{-z/2} \, z^{b/2} \, L_v^{\,b}(z)$$

Il suffit donc de calculer le rapport $\frac{\psi_o}{\psi_1}$

$$\frac{\psi_o}{\psi_1} = \left(\frac{z_o}{z_1}\right)^{b/2} e^{-\frac{1}{2}(z_o - z_1)} \cdot \frac{L(z_o)}{L(z_1)}$$

avec :

$$z_1 = Ke^{-ax_1} = Ke^{-ax_o + a(\psi_o/\psi'_o)} = z_o e^{a(\psi_o/\psi'_o)}$$

Les valeurs de z_o et de $\frac{\psi_o}{\psi'_o}$ ont été calculées dans le chapitre I. Le calcul de z_1 ne présente aucune difficulté. Il reste à calculer $\frac{L(z_o)}{L(z_1)}$. Les valeurs de $L(z_o)$ ont été obtenues en calculant $\frac{\psi'_o}{\psi_o}$. Nous sommes donc amenés à effectuer le calcul, par la méthode exposée dans le chapitre I, de

39 nouveaux polynômes de Laguerre $L_v^b(z_1)$, 20 pour l'état $B\Sigma$ et 19 pour l'état $X\Sigma$.

Les résultats de nos calculs sont donnés graphiquement dans la figure 5. Nous portons, pour chacun des états étudiés, le nombre quantique de vibration en abscisse et les valeurs calculées de $\frac{\Psi_0}{\Psi_1}$ en ordonnées.

4. - Approximations. - Nous remarquons que pratiquement, à partir du niveau v = 4, le rapport $\frac{\Psi_0}{\Psi_1}$ devient une constante à un dixième près, ce qui correspond à une erreur relative inférieure à $3 \cdot 10^{-2}$. Sur le graphique Ψ_0 est de l'ordre de 2 cm, $\frac{\Psi_0}{\Psi_1}$ étant de l'ordre de 4,3 , Ψ_1 est de l'ordre de 4,5 mm.

Prendre $\frac{\Psi_0}{\Psi_1} = 4{,}25$ quel que soit $v > 4$ revient à provoquer une erreur de l'ordre de 0,1 mm, ce qui peut être considéré comme négligeable.

D'autre part, après avoir tracé ces branches gauches, nous avons remarqué que ces branches ressemblent à des branches de parabole.

L'équation de la parabole de sommet S, et en tangente en S à l'axe des abscisses est (Cf.fig.6) :

$$\Psi = \alpha (x - x_2)^2.$$

Dérivons :

$$\Psi' = 2\alpha(x - x_2).$$

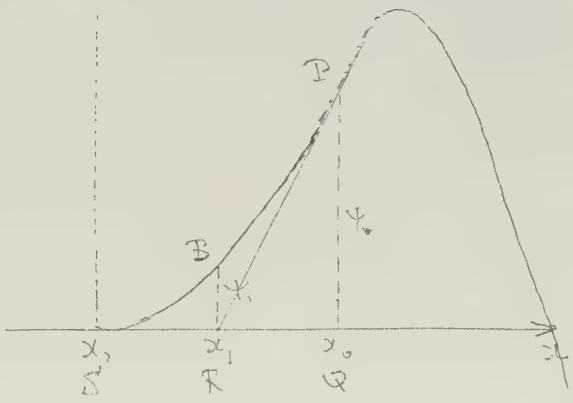


Fig. 6

Pour que cette parabole passe par le point P et ait en P la tangente PR, il faut que :

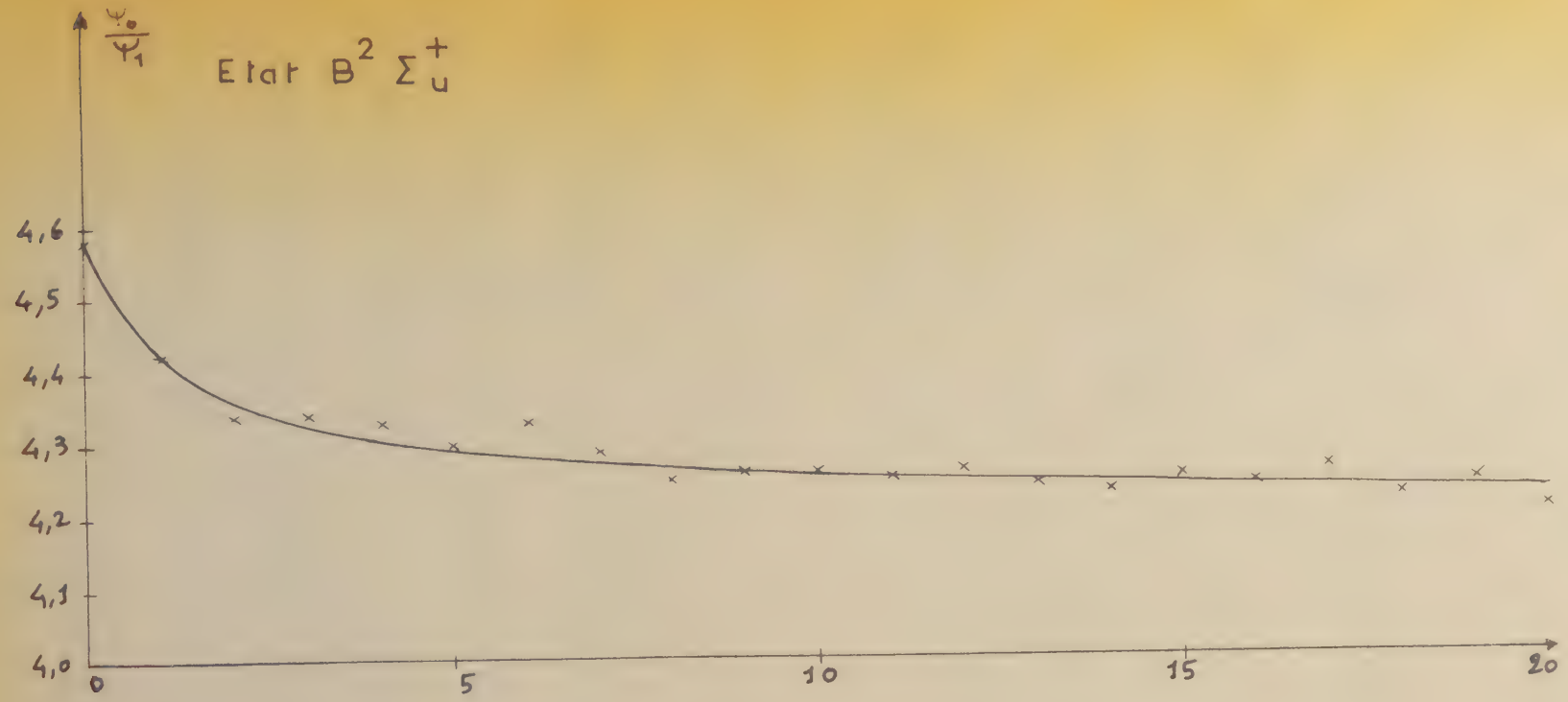
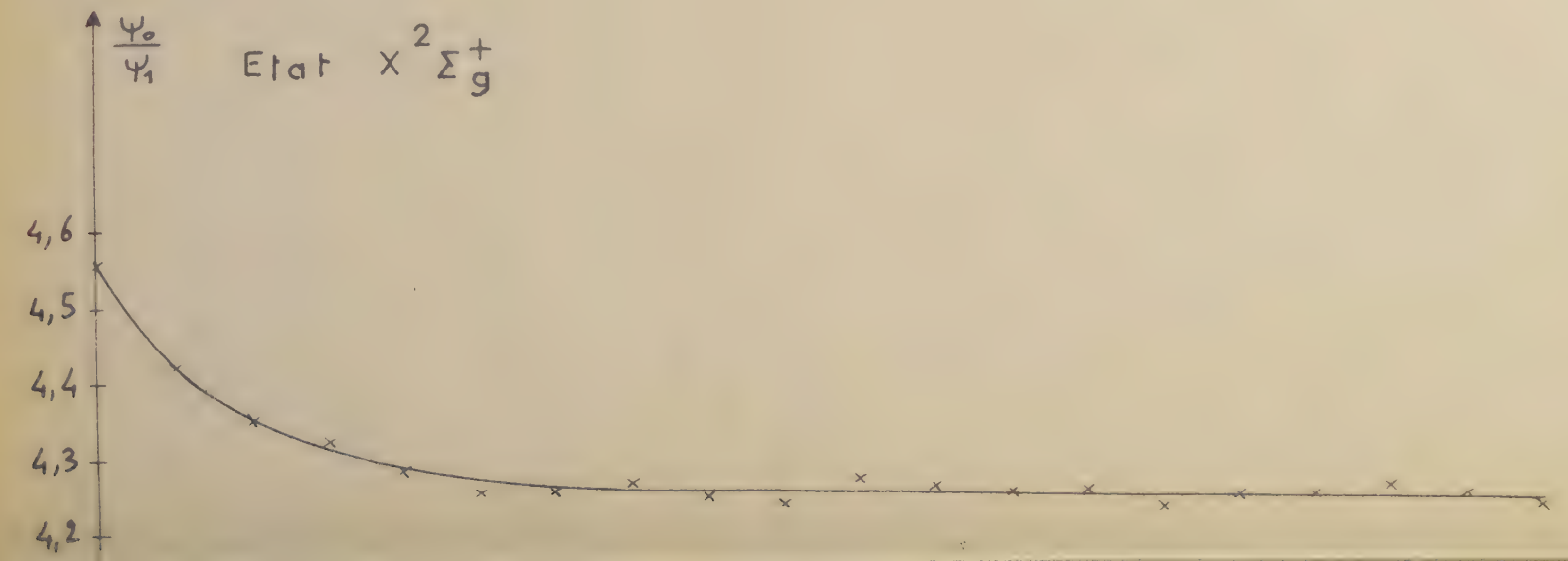

$\frac{\psi_0}{\psi_1}$
Etat $B^2\Sigma_u^+$
4,6
4,5
4,4
4,3
4,2
4,1
4,0
0
5
10
15
20

FIG 5


$\frac{\psi_0}{\psi_1}$
Etat $X^2\Sigma_g^+$
4,6
4,5
4,4
4,3
4,2

$$\Psi_o = 2\alpha (x_o - x_2)^2$$

et

$$\Psi'_o = 2\alpha (x_o - x_2)^2$$

D'où : $\frac{\Psi'_o}{\Psi_o} = \frac{2}{x_o - x_2}$, c'est-à-dire $x_2 = x_o - 2\frac{\Psi_o}{\Psi'_o}$

Ce qui fait que la distance QS est le double de la sous-tangente QR.

D'où : $\frac{\Psi_o}{\Psi_1} = \frac{\alpha (x_o - x_2)^2}{\alpha (x_1 - x_2)^2} = 4$, quel que soit le point P, c'est-à-dire quel que soit le niveau v des deux états étudiés.

Or la valeur calculée de $\frac{\Psi_o}{\Psi_1}$ est 4,25. La différence entre 4 et 4,25 correspond sur les graphiques à 0,3 mm, qui est de l'ordre de l'erreur graphique. La représentation de la branche gauche par une parabole pourraît donc être satisfaisante à partir du niveau v = 4.

5. - Résultats. - Nous avons tracé la branche gauche de toutes les courbes enregistrées. Nous dressons dans le tableau III les coordonnées des fonctions d'ondes de l'état $X^2\Sigma_g^+$ pour v allant de 0 à 19. L'unité de l'abscisse r est l'angström, celle de l'ordonnée Ψ est le centimètre.

Le tableau III' contient les mêmes éléments pour les fonctions d'onde de l'état $B^2\Sigma_u^+$ pour v allant de 0 à 20.

Les figures 7, 8, 9 et 10 représentent quatre fonctions d'onde enregistrées à l'aide de la machine analogique, et dont les parties terminales droites et gauches sont tracées à la main suivant les méthodes exposées dans ce chapitre et dans le chapitre précédent.

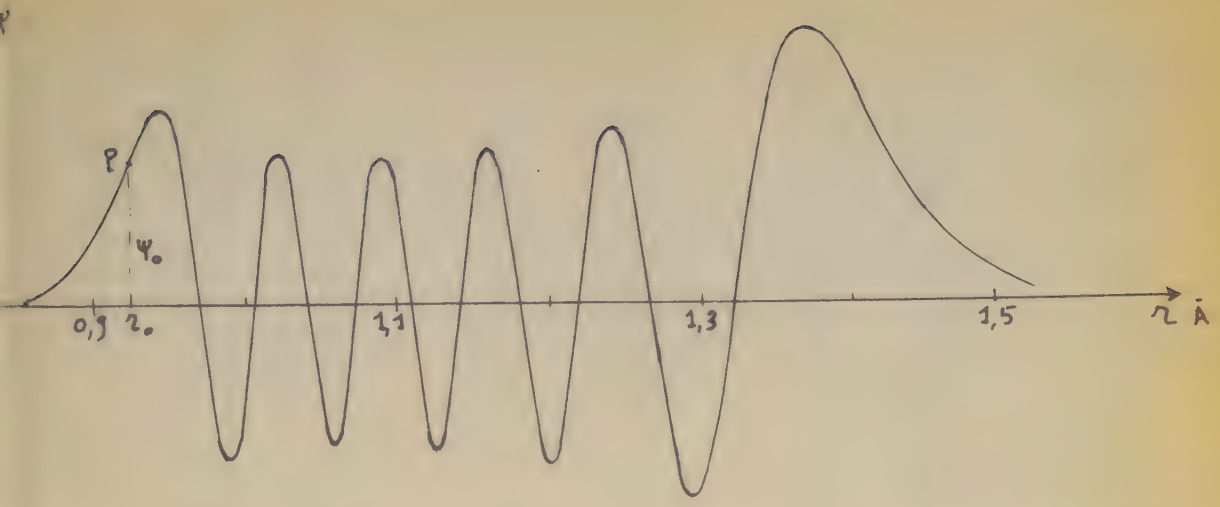


FIG. 8 Tracé de la fonction d'onde du niveau v = 10 de l'état $B^2\Sigma_u^+$

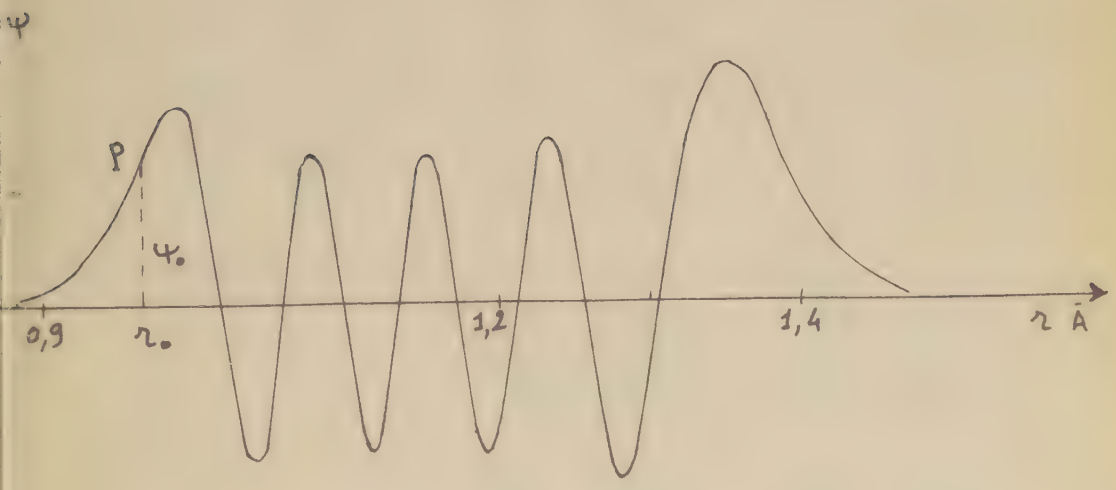


FIG. 7 Tracé de la fonction d'onde du niveau v = 8 de l'état $X^2\Sigma_g^+$

TABLEAU III

(Etat $X^2\Sigma^+_g$)

v = 0		v = 1		v = 2		v = 3	
r	Ψ	r	Ψ	r	Ψ	r	Ψ
1,002	+ 0,15	0,974	+ 0,15	0,967	+ 0,17	0,942	+ 0,15
12	0,20	84	0,20	77	0,30	52	0,25
22	0,40	94	0,35	87	0,55	62	0,43
32	0,60	1,004	0,55	97	0,75	72	0,65
42	0,85	14	0,80	1,007	1,10	82	0,90
1,052	1,20	1,024	1,15	1,017	1,50	0,992	1,25
62	1,50	34	1,50	27	1,90	1,002	1,55
72	1,90	44	1,85	37	2,20	12	1,90
82	2,15	54	2,30	47	2,60	22	2,25
92	2,50	64	2,65	57	2,80	32	2,60
1,102	2,80	1,074	2,80	1,067	2,75	1,042	2,72
12	2,90		2,85	77	2,20	52	2,40
22	3,00	84	2,80	87	1,35	62	1,65
32	2,95	94	2,45	97	0,10	72	0,50
42	2,80	1,104	1,90	1,107	-1,15	82	-0,70
1,152	2,40	1,114	1,00	1,117	2,00	1,092	1,70
62	2,05	24	-0,20	27	2,40	1,102	2,30
72	1,70	34	1,20	37	2,50	12	2,25
82	+1,30	44	2,00	47	2,10	22	1,65
92	1,00	54	2,60	57	1,30	32	0,45
1,202	0,70	1,164	3,00	1,167	0,15	1,142	+0,85
12	0,50	74	3,12	77	+1,00	52	1,85
22	0,30	84	3,05	87	1,95	62	2,30
32	0,20	94	2,90	97	2,60	72	2,25
42	0,10	1,204	2,50	1,207	3,00	82	1,55
		1,214	2,00	1,217	3,10	1,192	0,40
		24	1,50	27	3,00	1,202	-0,85
		34	1,20	37	2,80	12	1,80
		44	0,90	47	2,40	22	2,60
		54	0,70	57	2,00	32	2,95
		1,264	0,50	1,267	1,50	1,242	3,00
		74	0,30	77	1,00	52	2,80
		84	0,10	87	0,75	62	2,40
				97	0,45	72	1,90
				1,307	0,25	82	1,40
				1,317	0,15	1,292	1,00
						1,302	0,75
						12	0,50
						22	0,30
						32	0,20
						1,342	0,10

v = 4		v = 5		v = 6			
r	ψ	r	ψ	r	ψ	r	ψ
0,930	+ 0,15	0,920	+0,15	1,360	-0,65	0,911	+ 0,10
40	0,25	30	0,25	70	0,40	21	0,20
50	0,45	40	0,45	80	0,20	31	0,33
60	0,65	50	0,60	90	0,05	41	0,55
70	0,95	60	0,90			51	0,85
0,980	1,25	0,970	1,25			0,961	1,20
90	1,55	80	1,55			71	1,50
1,000	1,90	90	1;85			81	1,90
10	2,15	1,000	2,25			91	2,25
20	2,55	10	2,55			1,001	2,65
1,030	2,65		2,60			1,011	2,65
40	2,50	20	2,55			21	2,20
50	1,50	30	2,00			31	0,90
60	0,20	40	0,90			41	-0,40
70	-1,20	50	-0,40			51	1,70
1,080	2,10	1,060	1,65			1,061	2,20
90	2,20	70	2,20			71	1,75
1,100	1,50	80	2,05			81	1,30
10	0,25	90	0,90			91	+1,10
20	+1,10	1,110	+0,60			1,101	2,05
							2,10
1,130	1,95	1,120	1,80				
40	2,20	30	2,10			11	2,00
50	1,90	40	1,40			21	1,00
60	0,55	50	0,00			31	-
70	-0,00	60	-1,40			41	1,85
1,180	1,85	1,170	2,10			1,151	2,10
90	2,35	80	2,10			61	1,20
1,200	2,20	90	1,25			71	+0,40
10	1,40	1,200	+0,15			81	1,65
20	0,10	10	1,50			91	2,15
1,230	+1,10	1,220	2,20			1,201	2,00
40	2,00		2,30			11	0,75
50	2,65	30	2,20			21	-0,70
60	2,90	40	1,60			31	1,90
70	2,85	50	0,30			41	2,35
1,280	2,80	1,260	-0,90			1,251	2,25
90	2,30	70	1,95			61	1,30
1,300	1,85	80	2,65			71	0,00
10	1,40	90	3,00			81	+1,30
20	1,10	1,300	3,00			91	2,30
1,330	0,85	1,310	2,80			1,301	2,90
40	0,60	20	2,40			11	3,10
50	0,45	30	1,80			21	3,05
60	0,30	40	1,40			31	2,90
70	0,20	50	0,95			41	2,40
1,380	0,10						

v = 6 (suite)

r	ψ
1,351	+1,90
61	1,50
71	1,25
81	1,90
91	0,70
1,401	0,50
11	0,30
21	0,20
31	0,10

v = 7

r	ψ
0,903	0,10
13	0,20
23	0,34
33	0,55
43	0,85
0,953	1,20
63	1,50
73	1,85
83	2,35
93	2,62
1,003	2,45
13	1,50
23	0,20
33	-1,10
43	2,10
	2,18
53	2,10
63	1,00
73	+0,60
83	1,80
1,093	2,00
1,103	1,00
13	-0,60
23	1,75
33	2,00
1,143	1,10
53	+0,50
63	1,80
73	2,00
83	1,10
1,193	-0,40
1,203	1,75
13	2,12
23	1,65
33	0,40
1,243	+1,20
53	2,15
63	2,30
733	1,70
83	0,30
1,293	-0,90
1,303	2,00
13	2,70
23	3,00
	3,10

v =

r	ψ
1,333	-3,05
43	2,90
53	2,45
63	1,90
73	1,45
1,383	1,05
93	0,70
1,403	0,40
13	0,20
23	0,10

v = 8

r	ψ
0,896	+0,10
0,906	0,20
16	0,34
26	0,55
36	0,85
0,946	1,20
56	1,50
66	1,90
76	2,30
86	2,60
0,996	2,45
1,006	1,70
16	0,10
26	-1,20
36	2,05
1,046	1,80
56	0,45
66	+1,10
76	1,95
	2,00
1,086	1,80
96	0,40
1,106	-1,10
16	1,90
26	1,50
1,136	0,00
46	+1,50
56	2,00
66	1,40
76	-0,20
1,186	1,60
96	2,00
1,206	1,20
16	+0,35
26	1,65
1,236	2,15
46	1,70
56	0,30
66	-1,20
76	2,20
1,286	2,25
96	1,80
1,306	0,50
16	+0,80
26	1,90

v = 8 (suite)

r	ψ
1,336	2,75
46	3,10
56	3,15
66	3,00
76	2,70
1,386	2,00
96	1,50
1,406	1,00
16	0,70
26	0,50
1,436	+0,30
46	+0,20
56	+0,10

v = 9

r	ψ
0,890	0,10
0,900	0,20
10	0,32
20	0,53
30	0,85
0,940	1,20
50	1,50
60	1,85
70	2,40
80	2,60
0,990	2,30
1,000	1,15
10	-0,40
20	1,60
30	2,15
1,040	1,60
50	0,00
60	+1,50
70	1,95
80	1,15
1,090	-0,50
1,100	1,80
	1,95
10	1,80
20	0,60
1,130	+1,10
40	1,90
50	1,30
60	-0,35
70	1,70
1,180	1,95
90	0,70
1,200	+0,90
10	1,95
20	1,85
1,230	0,45
40	-1,20
50	2,10
	2,20
60	2,10
1,270	1,00
80	+0,60
90	1,85
1,300	2,40
10	2,10

r	ψ
1,320	1,15
30	-0,30
40	1,60
50	2,60
60	3,10
1,370	3,20
80	3,15
90	2,85
1,400	2,30
10	1,80
1,420	1,30
30	0,90
40	0,60
50	0,40
60	0,20
1,470	0,05

v = 10

r	ψ
0,884	0,10
94	0,20
0,904	0,32
14	0,55
24	0,80
0,934	1,20
44	1,50
54	1,90
64	2,35
74	2,70
0,984	2,50
94	1,40
1,004	-0,20
14	1,50
24	2,10
1,034	1,50
44	+0,20
54	1,60
1,064	2,00
74	1,20
1,084	-0,60
94	1,80
	1,90
1,104	1,60
14	+0,20
1,124	1,60
34	0,90
44	0,80
54	-1,00
64	1,90
1,174	1,40
84	+0,40
94	1,70
1,204	2,00
14	1,00
1,224	-0,90
34	2,00
44	1,85
54	0,40
64	+1,20
1,274	2,15
84	2,15
94	1,10
1,304	-0,50
14	1,80

v = 10 (suite)		v = 11		v = 11		v = 12	
r	ϕ	r	ϕ	r	ϕ	r	ϕ
1,324	-2,45	+0,878	+0,10	1,328	+1,30	0,873	+0,10
34	2,30	88	0,20	38	2,30	83	0,20
44	1,30	98	0,30	48	2,40	93	0,30
54	+0,20	0,908	0,55	58	1,75	0,903	0,55
64	1,40	18	0,80	68	0,35	13	0,80
1,374	2,45	0,928	1,20	1,378	-1,00	0,923	1,20
84	3,10	38	1,50	88	2,20	33	1,50
94	3,30	48	1,90	98	2,90	43	1,90
1,404	3,25	58	2,40	1,408	3,30	53	2,35
14	3,00	68	2,60	18	3,25	63	2,60
1,424	2,50	0,9788	2,50	1,428	3,00	0,973	2,30
34	1,80	88	1,25	38	2,55	83	1,20
44	1,40	98	-0,40	48	2,00	93	-0,70
54	1,00	1,008	1,60	58	1,50	1,003	1,80
64	0,65	18	2,15	68	1,00	13	2,05
1,474	0,40	1,028	1,30	1,478	0,80	1,023	0,50
84	0,25	38	+0,40	88	0,55	33	+1,20
94	0,10	48	1,75	98	0,40	43	1,90
		58	1,90	1,508	0,20	53	1,40
		68	0,30	18	0,10	63	-0,40
		1,078	-1,40			1,073	1,80
		88	1,90			83	1,60
		98	1,10			93	+0,10
		1,108	+0,85			1,103	1,65
		18	1,80			13	1,80
		1,128	1,40			1,123	0,30
		38	-0,45			33	-1,40
		48	1,75			43	1,80
		58	1,80			53	0,50
		68	0,40			63	+1,30
		1,178	+1,40			1,173	1,85
		88	1,90			83	1,00
		98	1,00			93	-0,90
		1,208	-0,90			1,203	1,90
		18	1,95			13	1,40
		1,228	1,80			1,223	+0,40
		38	0,10			33	1,75
		48	+1,50			43	1,85
		58	2,05			53	0,50
		68	1,30			63	-1,20
		1,278	-0,20			1,273	2,00
		88	1,75			83	1,60
		98	2,25			93	0,10
		1,308	1,80			1,303	+1,40
		18	0,30			13	2,20

v = 12 (suite)

r	ψ
1,323	+2,00
33	0,70
43	-1,00
53	2,20
63	2,50
1,373	2,00
83	1,80
93	+0,50
1,403	1,85
13	2,65
1,423	3,15
33	3,30
43	3,20
53	2,80
63	2,20
1,473	1,80
83	1,35
93	0,90
1,503	0,60
13	0,35
1,523	0,20
33	0,10

v = 13

r	ψ
0,888	+0,20
93	0,30
98	0,40
0,903	0,50
08	0,65
0,913	0,80
18	1,00
23	1,20
28	1,40
33	1,60
0,938	1,85
43	2,10
48	2,35
53	2,50
58	2,55
0,963	2,45
68	2,05
73	1,40
78	0,70
83	-0,20
0,988	1,00
93	1,60
98	1,95
1,003	2,05
08	1,85
1,013	1,25
18	0,50
23	+0,60
28	1,30
33	1,80
1,038	1,85
43	1,50
48	0,50
53	-0,30
58	1,20
1,063	1,70
68	1,80
73	1,65
78	1,10
82	0,00
1,088	+1,00
93	1,60
98	1,75
1,103	1,50
08	0,70

r	ψ
1,113	-0,20
18	1,00
23	1,70
28	1,80
33	1,60
1,138	1,10
42	0,00
48	+0,80
53	1,50
58	1,75
1,163	1,60
68	0,90
73	-0,10
78	0,90
83	1,60
1,188	1,85
93	1,30
98	0,40
1,203	+0,50
08	1,40
1,213	1,75
18	1,80
23	1,50
28	0,50
33	-0,35
1,238	1,30
43	1,75
48	1,95
53	1,90
58	1,50
1,263	0,70
68	+0,30
73	1,20
78	1,75
83	2,00
1,288	1,90
93	1,50
98	0,70
1,303	-0,20
08	1,00
1,313	1,60
18	2,10
23	2,25
28	1,90
33	1,20

r	ψ
1,338	-0,50
43	+0,50
48	1,25
53	1,75
58	2,15
1,363	2,40
68	2,40
73	2,25
78	1,90
83	1,20
1,388	0,55
93	-0,30
98	0,90
1,403	1,60
08	2,15
1,413	2,60
18	2,95
23	3,10
28	3,25
33	3,30
1,438	3,28
43	3,15
48	2,90
53	2,75
58	2,50
1,463	2,25
68	1,75
73	1,55
78	1,40
83	1,20
1,488	1,00
93	0,80
98	0,60
1,503	0,45
08	0,30
1,513	0,25
18	0,20
23	0,15
28	0,10

r	ψ	r	ψ	r	ψ	r	ψ
0,983	+0,15	1,108	+0,10	1,333	+1,30	1,558	+0,40
88	0,25	13	-1,00	38	1,80	63	0,30
93	0,37	18	1,60	43	2,15	68	0,20
98	0,50	23	1,75	48	2,20	73	0,10
0,903	0,65	28	1,50	53	2,10		
0,908	0,80	1,133	0,75	1,358	1,65		
13	1,00	38	+0,30	63	0,85		
18	1,20	43	1,10	68	0,00		
23	1,40	48	1,60	73	-0,80		
28	1,50	53	1,75	78	1,50		
0,933	1,85	1,158	1,50	1,383	2,00		
38	2,00	63	0,55	88	2,40		
43	2,25	68	-0,35	93	2,50		
48	2,45	73	1,15	98	2,45		
53	2,55	78	1,65	1,403	2,20		
0,958	2,50	1,183	1,75	1,408	1,65		
63	2,25	88	1,55	13	1,10		
68	1,80	93	0,70	18	0,35		
73	1,20	98	+0,30	23	+0,30		
78	0,10	1,203	1,10	28	1,00		
0,983	-0,75	1,208	1,70	1,433	1,60		
88	1,50	13	1,80	38	2,15		
93	1,90	18	1,60	43	2,50		
98	2,05	23	0,80	48	2,90		
1,003	1,90	28	-0,10	53	3,10		
1,008	1,10	1,233	1,10	1,458	3,25		
13	0,20	38	1,55	63	3,30		
18	+0,70	43	1,90	68	3,30		
23	1,30	48	1,00	73	3,25		
28	1,80	53	0,00	78	3,15		
1,033	1,85	1,258	+0,70	1,483	2,95		
38	1,65	63	1,50	88	2,70		
43	1,10	68	1,90	93	2,45		
48	0,00	73	1,90	98	2,20		
53	-0,90	78	1,70	1,503	2,00		
1,058	1,60	1,283	1,00	1,508	1,80		
63	1,80	88	0,00	13	1,60		
68	1,65	93	-0,80	18	1,40		
73	1,00	98	1,65	23	1,20		
78	0,00	1,303	1,95	28	1,10		
1,083	+0,90	1,308	2,05	1,533	0,95		
88	1,60	13	1,85	38	0,85		
93	1,75	18	1,20	43	0,70		
98	1,60	23	0,30	48	0,60		
1,103	0,90	28	+0,60	53	0,50		

v = 15

r	Ψ	r	Ψ	r	Ψ	r	Ψ
0,879	+0,15	1,104	-1,00	1,329	+2,05	1,554	-0,80
84	0,25	09	1,70	34	2,05	59	0,65
89	0,33	14	1,80	39	1,70	64	0,55
94	0,40	19	1,50	44	1,00	69	0,45
99	0,55	24	0,75	49	0,00	74	0,35
0,904	0,70	1,129	+0,20	1,354	-0,70	1,579	0,25
09	0,90	34	1,10	59	1,50	84	0,15
14	1,10	39	1,70	64	2,05	89	0,80
19	1,35	44	1,65	69	2,30		
24	1,60	49	1,10	74	2,30		
0,929	1,85	1,154	0,20	1,379	2,10		
34	2,15	59	-0,90	84	1,50		
39	2,25	64	1,50	89	0,60		
44	2,50	69	1,80	94	+0,20		
49	2,60	74	1,75	99	1,10		
0,954	2,55	1,179	1,10	1,404	1,70		
59	2,20	84	0,20	09	2,30		
64	1,60	89	+0,70	14	2,45		
69	0,80	94	1,50	19	2,50		
74	0,00	99	1,75	24	2,40		
0,979	-0,90	1,204	1,65	1,429	2,00		
84	1,65	09	1,00	34	1,50		
89	1,95	14	0,00	39	0,80		
94	2,10	19	-1,00	44	0,10		
99	1,95	24	1,60	49	-0,60		
1,004	1,35	1,229	1,90	1,454	1,30		
09	0,40	34	1,80	59	1,90		
14	+0,60	39	1,20	64	2,40		
19	1,40	44	0,40	69	2,80		
24	1,85	49	+0,50	74	3,15		
1,029	1,85	1,254	1,40	1,479	3,30		
34	1,30	59	1,80	84	3,42		
39	0,80	64	1,85	89	3,45		
44	-0,50	69	1,50	94	3,30		
49	1,30	74	0,70	99	3,00		
1,054	1,85	1,279	-0,20	1,504	2,80		
59	1,85	84	1,10	09	2,60		
64	1,30	89	1,70	14	2,40		
69	0,50	94	2,00	19	2,00		
74	+0,60	99	2,00	24	1,80		
1,079	1,40	1,304	1,70	1,529	1,60		
84	1,75	09	0,80	34	1,40		
89	1,60	14	0,00	39	1,20		
94	0,70	19	+1,00	44	1,00		
99	-0,30	24	1,70	49	0,90		

v = 16

r	ψ	r	ψ	r	ψ	r	ψ
0,875	+0,10	1,100	-1,60	1,325	+0,70	1,550	+1,85
80	0,20	05	1,80	30	-0,30	55	1,70
85	0,30	10	1,45	35	1,20	60	1,65
90	0,40	15	0,50	40	1,80	65	1,40
95	0,50	20	+0,40	45	2,15	70	1,25
0,890	0,65	1,125	1,40	1,350	2,15	1,575	1,05
0,905	0,85	30	1,75	55	1,75	80	0,90
10	1,05	35	1,75	60	1,00	85	0,80
15	1,35	40	1,10	65	0,10	90	0,65
20	1,55	45	0,15	70	+0,80	95	0,55
0,925	1,90	1,150	-1,00	1,375	1,60	1,600	0,40
30	2,10	55	1,60	80	2,15	05	0,30
35	2,30	60	1,80	85	2,30	10	0,25
40	2,55	65	1,50	90	2,30	15	0,15
45	2,67	70	0,40	95	2,10	20	0,10
0,950	2,65	1,175	+0,40	1,400	1,70		
55	2,40	80	1,30	05	0,60		
60	1,10	85	1,75	10	-0,40		
65	0,20	90	1,80	15	1,10		
70	-0,70	95	1,35	20	1,90		
0,975	1,50	1,200	0,35	1,425	2,35		
80	1,90	05	-0,70	30	2,55		
85	2,10	10	1,40	35	2,62		
90	1,95	15	1,80	40	2,50		
95	1,30	20	1,80	45	2,15		
1,000	0,30	1,225	1,20	1,450	1,55		
05	+0,60	30	0,20	55	0,80		
10	1,30	35	+0,80	60	0,10		
15	1,85	40	1,60	65	+0,60		
20	1,90	45	1,85	70	1,30		
1,025	1,65	1,250	1,85	1,475	2,00		
30	0,90	55	1,35	80	2,50		
35	-0,20	60	0,36	85	2,95		
40	1,20	65	-0,70	90	3,25		
45	1,75	70	1,40	95	3,40		
1,050	1,80	1,275	1,90	1,500	3,50		
55	1,40	80	2,00	05	3,52		
60	0,50	85	1,55	10	3,50		
65	+0,60	90	0,60	15	3,40		
70	1,40	95	+0,30	20	3,25		
1,075	1,75	1,300	1,20	1,525	3,00		
80	1,70	05	1,80	30	2,80		
85	1,30	10	2,05	35	2,50		
90	0,10	15	2,00	40	2,30		
95	-0,80	20	1,50	45	2,05		

v = 17

r	ψ	r	ψ	r	ψ	r	ψ
0,871	0,15	1,096	1,80	1,321	-2,00	1,546	-2,80
76	0,20	1,101	1,80	26	2,15	51	2,50
81	0,30	06	1,50	31	2,00	56	2,30
86	0,38	11	0,40	36	1,35	61	1,90
91	0,50	16	+0,70	41	0,40	66	1,70
0,896	0,65	1,121	1,50	1,346	+0,60	1,571	1,50
0,901	0,80	26	1,75	51	1,40	76	1,30
06	1,00	31	1,40	56	2,00	81	1,15
11	1,30	36	0,30	61	2,20	86	0,95
16	1,55	41	-0,70	66	2,10	91	0,80
0,921	1,85	1,146	1,50	1,371	1,55	1,596	0,75
26	2,10	51	1,85	76	0,50	1,601	0,67
31	2,40	56	1,10	81	-0,25	06	0,57
36	2,55	61	0,00	86	1,15	11	0,45
41	2,60	66	+1,15	91	1,90	16	0,35
0,946	2,55	1,171	1,70		2,30	1,621	-0,25
51	2,00	76	1,80	1,401	2,40	26	0,15
56	1,40	81	1,30	06	2,35	31	0,10
61	0,50	86	0,30	11	2,00	36	0,05
66	-0,40	91	-0,75	16	1,30		
0,971	1,40	1,196	1,50	1,421	0,30		
76	1,85	1,201	1,90	26	+0,60		
81	2,10	06	1,80	31	1,40		
86	2,10	11	1,20	36	2,00		
91	1,80	16	0,10	41	2,40		
0,996	0,80	1,221	+0,90	1,446	2,60		
1,001	+0,40	26	1,70	51	2,60		
06	1,20	31	1,85	56	2,35		
11	1,80	36	1,60	61	1,90		
16	1,90	41	0,90	66	1,25		
1,021	1,45	1,246	-0,20	1,471	0,55		
26	0,70	51	1,10	76	-0,30		
31	-0,50	56	1,80	81	0,80		
36	1,40	61	2,00	86	1,60		
41	1,85	66	1,80	91	2,20		
1,046	1,90	1,271	1,30	1,496	2,70		
51	1,60	76	0,30	1,501	3,10		
56	0,70	81	+0,75	06	3,30		
61	+0,60	86	1,75	11	3,50		
66	1,40	91	2,00	16	3,55		
1,071	1,80	1,296	1,85	1,521	3,58		
76	1,60	1,301	1,30	26	3,55		
81	0,70	06	0,30	31	3,45		
86	-0,20	11	-0,60	36	3,30		
91	1,25	16	1,50	41	3,05		

v = 18

r	ϕ	r	ϕ	r	ϕ	r	ϕ
0,868	+0,10	1,093	-1,75	1,318	-1,90	1,543	+3,57
73	0,20	98	1,70	23	1,50	48	3,60
78	0,30	1,103	1,00	28	0,70	53	3,55
83	0,40	08	+0,20	33	+0,30	58	3,45
88	0,50	13	1,10	38	1,30	63	3,30
0,893	0,65	1,118	1,70	1,343	1,80	1,568	3,05
98	0,80	23	1,70	48	2,05	73	2,80
0,903	1,00	28	1,35	53	2,00	78	2,60
08	1,30	33	0,40	58	1,50	83	2,40
13	1,55	38	-0,70	63	0,75	88	2,10
0,918	1,85	1,143	1,50	1,368	-0,30	1,593	1,90
23	2,10	48	1,70	73	1,10	98	1,75
28	2,35	53	1,40	78	1,70	1,603	1,60
33	2,57	58	0,25	83	2,10	08	1,40
38	2,62	63	+0,70	88	2,10	13	1,25
0,943	2,60	1,168	1,50	1,393	1,90	1,618	1,15
48	2,25	73	1,75	98	1,00	23	1,00
53	1,55	78	1,60	1,403	0,20	28	0,90
58	0,80	83	0,80	08	+0,80	33	0,80
63	-0,20	88	-0,30	13	1,50	38	0,70
0,968	1,10	1,193	1,20	1,418	2,10	1,643	0,60
73	1,70	98	1,70	23	2,35	48	0,50
78	2,00	1,203	1,70	28	2,35	53	0,40
83	2,05	08	1,00	33	2,15	58	0,30
88	1,60	13	0,00	38	1,60	63	0,20
0,993	0,60	1,218	+1,00	1,443	0,85	1,668	0,10
98	+0,50	23	1,70	48	0,00		
1,003	1,40	28	1,80	53	-0,90		
08	1,85	33	1,60	58	1,55		
13	1,90	38	0,60	63	2,10		
1,018	1,55	1,243	-0,40	1,468	2,45		
23	0,80	48	1,30	73	2,60		
28	-0,30	53	1,75	78	2,55		
33	1,20	58	1,73	83	2,30		
38	1,75	63	1,20	88	1,75		
1,043	1,80	1,268	0,20	1,493	1,20		
48	1,30	73	+0,90	98	0,50		
53	0,30	78	1,60	1,503	+0,30		
58	+0,70	83	1,90	08	1,20		
63	1,55	88	1,93	13	1,75		
1,068	1,75	1,293	1,40	1,518	2,30		
73	1,60	98	0,50	23	2,80		
78	0,80	1,303	-0,50	28	3,15		
83	0,00	08	1,40	33	3,35		
88	-1,20	13	1,90	38	3,50		

v = 19

r	ψ	r	ψ	r	ψ	r	ψ
0,864	0,10	1,089	1,75	1,314	-1,25	1,539	-2,35
69	0,20	94	1,45	19	0,30	44	2,80
74	0,30	99	0,50	24	+0,70	49	3,20
79	0,40	1,104	+0,70	29	1,65	54	3,40
84	0,50	09	1,45	34	1,98	59	3,55
0,889	0,65	1,114	1,70	1,339	1,95	1,564	3,62
94	0,80	19	1,35	44	1,40	69	3,66
99	1,00	24	0,40	49	0,50	74	3,60
0,904	1,25	29	-0,60	54	-0,50	79	3,50
09	1,55	34	1,40	59	1,30	84	3,40
0,914	1,85	1,139	1,70	1,364	1,85	1,589	3,20
19	2,05	44	1,55	69	2,10	94	2,90
24	2,35	49	0,95	74	2,00	99	2,65
29	2,55	54	+0,30	79	1,50	1,604	2,40
34	2,62	59	1,20	84	0,60	09	2,25
0,939	2,52	1,164	1,68	1,389	+0,50	1,614	-2,00
44	2,10	69	1,62	94	1,40	19	1,85
49	1,60	74	1,00	99	1,95	24	1,70
54	0,60	79	0,00	1,404	2,20	29	1,55
59	-0,30	84	-0,90	09	2,15	34	1,40
0,964	1,30	1,189	1,70	1,414	1,70	1,639	1,30
69	2,20	94	1,75	19	1,00	44	1,10
74	2,05	99	1,35	24	0,00	49	1,00
79	2,05	1,204	0,30	29	-0,90	54	0,90
84	1,70	09	+0,70	34	1,60	59	0,80
0,989	0,70	1,214	1,55	1,439	2,10	1,664	0,70
94	+0,40	19	1,75	44	2,35	69	0,60
99	1,30	24	1,40	49	2,35	74	0,50
1,004	1,85	29	0,65	54	2,15	79	0,40
09	1,85	34	-0,50	59	1,50	84	0,30
1,014	1,40	1,239	1,30	1,464	0,65	1,689	0,20
19	0,40	44	1,75	69	+0,20	94	0,10
24	-0,60	49	1,80	74	1,10		
29	1,40	54	1,35	79	1,80		
34	1,80	59	0,50	84	2,35		
1,039	1,75	1,264	+0,70	1,489	2,60		
44	1,10	69	1,50	94	2,70		
49	0,10	74	1,85	99	2,60		
54	+1,00	79	1,70	1,504	2,25		
59	1,60	84	0,85	09	1,70		
1,064	1,70	1,289	0,00	1,514	1,00		
69	1,20	94	-1,00	19	0,35		
74	0,20	99	1,70	24	-0,50		
79	-0,90	1,304	1,92	29	1,20		
84	1,60	09	1,85	34	1,70		

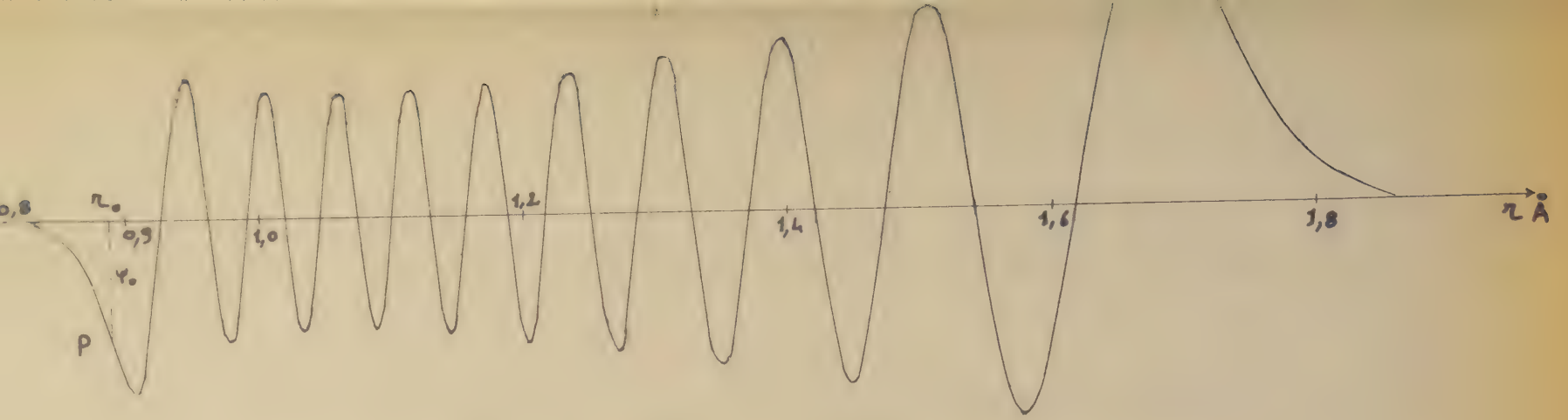


FIG.10 Tracé de la fonction d'onde du niveau v = 19 de l'état $B^2\Sigma_u^+$

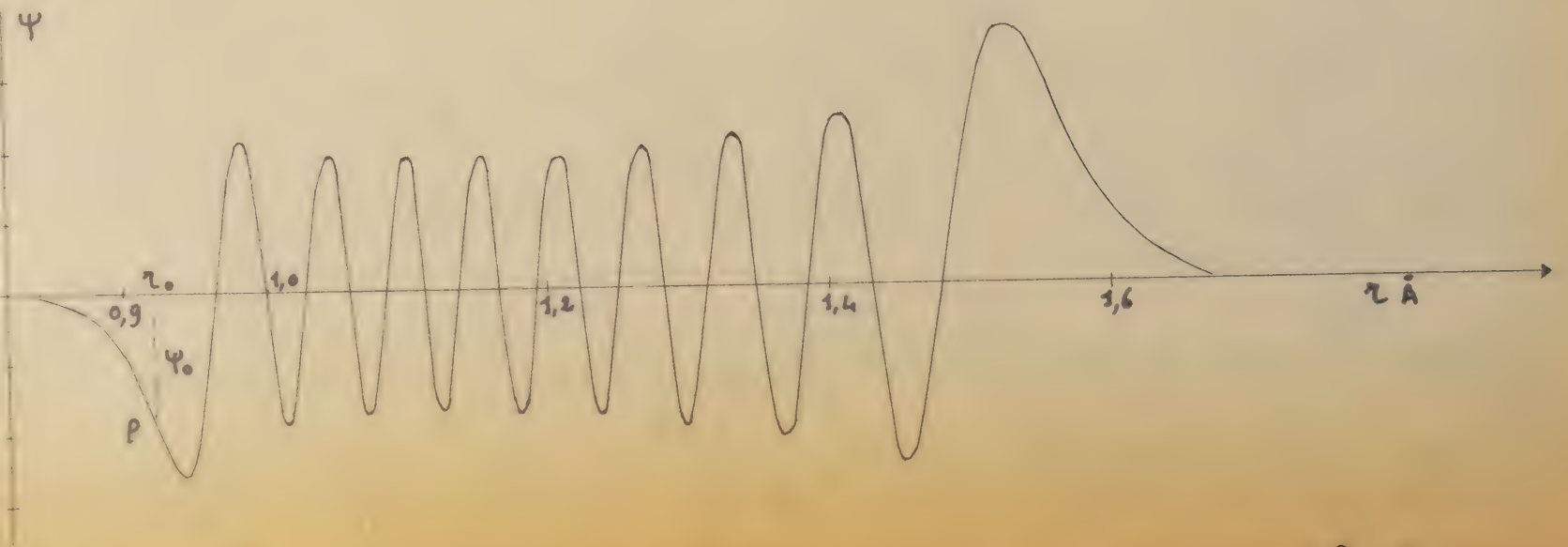


FIG. 9 Tracé de la fonction d'onde du niveau v = 17 de l'état $X^2\Sigma_g^+$

TABLEAU III'

(Etat $B^2\Sigma^+u$)

v = 0		v = 1		v = 2		v = 3	
r	ψ	r	ψ'	r	ψ	r	ψ'
0,963	+ 0,15	0,936	+ 0,15	0,919	+ 0,15	0,906	+ 0,12
73	0,30	46	0,30	29	0,25	16	0,25
83	0,45	56	0,45	39	0,40	26	0,35
93	0,65	66	0,65	49	0,60	36	0,50
1,003	0,85	76	0,85	59	0,85	46	0,80
1,013	1,15	0,986	1,15	0,969	1,10	0,956	1,10
23	1,50	96	1,50	79	1,50	66	1,45
33	1,90	1,006	1,85	89	1,95	76	1,95
43	2,20	16	2,20	99	2,40	86	2,20
53	2,50	26	2,50	1,009	2,70	96	2,60
1,063	2,80	1,036	2,70	1,019	2,72	1,006	2,70
73	2,95	46	2,65	29	2,40	16	2,40
83	2,98	56	2,15	39	1,65	26	1,35
93	2,92	66	1,50	49	0,60	36	0,30
1,103	2,60	76	0,40	59	-0,65	46	-1,00
1,113	2,30	1,086	-0,70	1,069	1,80	1,056	2,10
23	2,00	96	1,60	79	2,25	66	2,40
33	1,40	1,106	2,30	89	2,30	76	2,20
43	1,20	16	2,70	99	1,90	86	1,25
1,153	0,80	26	2,99	1,109	0,90	1,096	+0,30
1,163	0,50	1,136	2,93	1,119	+0,35	1,106	1,60
73	0,30	46	2,80	29	1,40	16	2,30
83	0,20	56	2,40	39	2,20	26	2,35
93	0,10	66	1,95	49	2,80	36	1,70
		76	1,55	59	3,00	46	0,60
		1,186	1,00	1,169	3,00	1,156	-0,50
		96	0,75	79	2,80	66	1,60
		1,206	0,50	89	2,40	76	2,40
		16	0,35	99	1,95	86	2,90
		26	0,20	1,209	1,60	96	3,10
		1,236	0,10	1,219	1,25	1,206	3,05
				29	0,90	16	2,85
				39	0,65	26	2,40
				49	0,40	36	2,00
				59	0,20	46	1,50
				1,269	0,10	1,256	1,10
						66	1,90
						76	0,70
						86	0,50
						96	0,30
						1,306	0,20
						16	0,10

v = 4		v = 5				v = 6	
r	ψ	r	ψ	r	ψ	r	ψ
0,895	+0,10	0,886	+0,10	1,316	-1,30	0,878	+0,10
0,905	0,18	96	0,20	26	1,05	88	0,20
15	0,30	0,906	0,35	36	0,90	98	0,35
25	0,45	16	0,50	46	0,70	0,908	0,50
35	0,75	26	0,75	56	0,50	18	0,75
0,945	1,05	0,936	1,05	1,366	0,30	0,928	1,05
55	1,45	46	1,45	76	0,20	38	1,45
65	1,90	56	1,85	86	0,10	48	1,90
75	2,40	66	2,40			58	2,30
85	2,65	76	2,60			68	2,60
0,995	2,10	0,986	2,35			0,978	2,45
1,005	1,95	96	1,50			88	1,50
15	0,70	1,006	0,00			98	0,10
25	-0,60	16	-1,10			1,008	-1,20
35	1,80	26	2,10			18	2,10
1,045	2,20		2,20			1,028	1,95
55	1,90	1,036	2,10			38	0,60
65	0,60	46	1,25			48	+1,00
75	+0,90	56	+0,30			58	1,90
85	2,00	66	1,60				2,05
1,095	2,25	1,076	2,10			1,068	2,00
1,105	1,80	86	1,65			78	0,90
15	0,55	96	0,30			88	-0,75
25	-0,90	1,106	-1,20			98	1,85
35	1,95	16	2,10				2,05
1,145	2,35	1,126	2,20			1,108	1,95
55	2,15	36	1,35			18	0,90
65	1,15	46	+0,30			28	+0,65
75	+0,20	56	1,55			38	1,85
85	1,50	66	2,30			48	2,20
1,195	2,35		2,40			1,158	1,75
1,205	2,90	1,176	2,30			68	0,30
15	3,15	86	1,50			78	-1,20
25	3,10	96	-0,30			88	2,05
35	2,95	1,206	1,00			98	2,35
1,245	2,55	1,216	2,00			1,208	2,10
55	2,15	26	2,75			18	1,00
65	1,80	36	3,10			28	+0,50
75	1,50	46	3,20			38	1,65
85	1,20	56	3,10			48	2,40
1,295	0,95	1,266	2,80			1,258	3,00
1,305	0,75	76	2,40			68	3,17
15	0,55	86	2,10			78	3,10
25	0,35	96	1,70			88	2,80

v = 6 (suite)

r	ψ
1,308	+1,90
18	1,40
28	1,00
38	0,75
48	0,50
1,358	0,35
68	0,20
78	0,10
88	0,05

v = 7

r	ψ
0,871	+0,10
81	0,20
91	0,30
0,901	0,45
11	0,70
0,921	1,00
31	1,40
41	1,85
51	2,35
61	2,50
0,971	2,20
81	1,00
91	-0,60
1,001	1,20
11	2,15
1,021	1,50
31	0,00
41	+1,60
51	2,00
61	1,20
1,071	0,40
81	1,70
91	2,02
1,101	1,10
11	+0,65
1,121	1,90
31	2,00
41	1,00
51	-0,60
61	1,85
1,171	2,20
81	1,70
91	0,20
1,201	+1,10
11	2,25
1,221	2,40
31	1,80
41	0,60
51	-0,75
61	1,90
1,271	2,70
81	3,20
91	3,30
1,301	3,25
11	2,90

r	ψ
1,321	-2,40
31	1,90
41	1,45
51	1,05
61	0,75
1,371	0,55
81	0,40
91	0,30
1,401	0,15
11	0,10
1,421	0,05

r	ψ
0,860	+ 0,10
70	0,20
80	0,30
90	0,45
0,900	0,70
0,910	1,00
20	1,40
30	1,90
40	2,25
50	2,55
0,960	2,40
70	1,25
80	-0,40
90	1,70
1,000	2,10
1,010	1,20
20	+0,40
30	1,70
40	1,95
50	1,00
1,060	-1,00
70	1,95
80	1,70
90	0,10
1,100	+1,40
1,110	2,00
20	1,50
30	0,00
40	-1,60
50	2,10
1,160	1,20
70	0,30
80	1,60
90	2,20
1,200	1,95
1,210	1,10
20	-1,00
30	2,15
40	2,40
50	2,15
1,260	1,20
70	+0,20
80	1,30
90	2,25
1,300	3,00

v = 8 (suite)

r	φ
1,310	+3,30
20	3,35
30	3,25
40	2,90
50	2,40
1,360	2,00
70	1,80
80	1,40
90	1,20
1,400	1,00
1,410	0,80
20	0,60
30	0,40
40	0,30
50	0,20
1,460	0,10

v = 9

r	φ
0,958	+0,10
68	0,20
78	0,30
88	0,45
98	0,70
0,908	1,00
18	1,40
28	1,85
38	2,30
48	2,55
0,958	2,10
68	0,80
78	-0,75
88	1,75
98	2,10
1,008	1,10
18	+0,70
28	1,80
	1,92
38	1,75
1,048	0,25
58	-1,30
68	1,95
78	1,40
88	+0,70
1,098	1,80
	1,90
1,108	1,60
18	0,20
28	-1,40
1,138	2,00
48	1,50
58	+0,35
68	1,70
78	2,05
1,188	1,10
98	-0,50
1,208	1,90
18	2,25
28	1,65
1,238	0,10
48	+1,40
58	2,35
68	2,52
78	2,00

r	φ
1,288	+0,90
98	-0,50
1,308	1,60
18	2,60
28	3,20
1,338	3,43
48	3,45
58	3,30
68	2,90
78	2,50
1,388	2,00
98	1,60
1,408	1,20
18	0,90
28	0,70
1,438	0,50
48	0,30
58	0,20
68	0,10

v = 10

r	φ
0,853	+0,10
63	0,20
73	0,30
83	0,45
93	0,70
0,903	1,00
13	1,40
23	1,90
33	2,40
43	2,60
0,953	2,10
63	0,70
73	-1,10
83	2,00
	2,05
0,993	1,80
1,003	0,00
13	+1,50
23	1,95
33	1,00
1,043	-0,90
53	1,90
63	1,30
73	+0,30
83	1,75
	1,92
93	1,85
1,103	0,50
13	-1,30
23	1,95
1,133	1,30
43	+0,50
53	1,80
63	2,00
73	1,00
1,183	-0,70
93	2,00
	2,15
1,203	2,00
13	0,75
1,223	+0,80
33	2,00
43	2,20
53	1,80
63	0,20

v = 10 (suite)

r	ψ
1,273	-1,20
83	2,35
93	2,60
1,303	2,25
13	1,25
1,323	0,90
33	+1,30
43	2,35
53	3,05
63	3,35
1,373	3,55
83	3,50
93	3,20
1,403	2,90
13	2,70
1,423	2,40
33	2,20
43	1,95
53	1,65
63	1,30
1,473	0,95
83	0,70
93	0,55
1,503	0,40
13	0,30
1,523	0,20
33	0,10

v = 11

r	ψ
0,848	+0,10
58	0,20
68	0,30
78	0,45
88	0,70
0,898	1,00
0,908	1,40
18	1,85
28	2,40
38	2,63
0,948	2,00
58	0,80
68	-1,10
78	1,95
	2,12
0,988	2,00
98	0,35
1,008	+1,60
18	1,90
28	0,70
1,038	-1,20
48	1,95
58	1,40
68	+0,60
78	1,90
1,088	1,40
98	-0,40
1,108	1,80
	2,00
18	1,90
1,128	0,50
38	+1,40
48	2,00
58	1,10
68	-0,80
1,178	1,95
	2,10
88	2,00
98	0,70
1,208	+1,25
1,218	2,15
28	+1,90
38	0,50
48	-1,20
58	2,20

r	ψ
1,268	-2,42
78	1,85
88	0,20
98	+1,40
1,308	2,50
1,318	2,75
28	2,40
38	1,30
48	0,00
58	-1,20
1,368	2,30
78	3,10
88	3,50
98	3,75
1,408	3,75
1,418	3,70
28	3,50
38	3,00
48	2,60
58	2,30
1,468	2,00
78	1,70
88	1,30
98	1,65
1,508	0,90
1,518	0,70
28	0,55
38	0,40
48	0,30
58	0,20
1,568	0,10

v = 12

r	ψ
0,844	+0,10
54	0,20
64	0,30
74	0,45
84	0,70
0,894	1,00
0,904	1,40
14	1,90
24	2,45
34	2,62
0,944	2,10
54	0,60
64	-1,00
74	2,00
	2,10
0,984	1,80
94	0,00
1,004	+1,60
14	1,95
24	0,95
1,034	-1,10
44	1,90
54	0,90
64	+1,00
74	1,90
1,084	1,20
94	-0,70
1,104	1,90
14	1,50
24	+0,30
1,134	1,80
	1,95
44	1,80
54	0,30
64	-1,45
1,174	2,05
84	1,10
94	+0,80
1,204	2,00
	2,12
1,214	1,95
24	0,70
34	-1,00
44	2,10
	2,30

v = 12 (suite)

r	ψ
1,254	-2,20
64	1,10
74	+0,50
84	1,95
94	2,45
1,304	2,25
14	1,10
24	-0,40
34	1,90
44	2,65
1,354	2,90
64	2,50
74	1,50
84	0,20
94	+1,20
1,404	2,25
14	3,10
24	3,55
34	3,75
44	3,80
1,454	3,70
64	3,50
74	3,10
84	2,70
94	2,40
1,504	2,05
14	1,70
24	1,35
34	1,10
44	0,95
1,554	0,75
64	0,60
74	0,45
84	0,30
94	0,20

v = 13

r	ψ
0,859	+0,20
64	0,30
69	0,43
74	0,55
79	0,70
0,884	0,85
89	1,00
94	1,20
99	1,40
0,904	1,65
0,909	1,85
14	2,10
19	2,35
24	2,52
29	2,60
0,934	2,50
39	2,10
44	1,50
49	0,60
54	-0,30
0,959	1,00
64	1,70
69	2;00
74	2,10
79	1,95
0,984	1,20
89	0,25
94	+0,75
1,009	1,50
14	1,90
1,019	1,85
24	1,40
29	0,50
34	-0,50
39	1,30
1,044	1,80
49	1,90
54	1,75
59	0,90
64	+0,10
1,069	1,00
74	1,55
79	1,80
84	1,60
89	0,80

r	ψ
1,094	-0,20
99	1,10
1,104	1,65
09	1,90
14	1,80
1,119	1,30
24	0,50
29	+1,40
34	1,85
39	1,80
1,144	1,20
49	0,40
54	-0,70
59	1,40
64	1,80
1,169	2,00
74	1,90
79	1,30
84	0,40
89	+0,65
1,194	1,50
99	1,95
1,204	2,00
09	1,70
14	0,80
1,219	0,00
24	-0,90
29	1,50
34	2,00
39	2,15
1,244	2,10
49	1,75
54	0,90
59	0,00
64	+1,00
1,269	1,65
74	2,15
79	2,30
84	2,20
89	1,80
1,294	1,10
99	0,30
1,304	-0,50
09	1,25
14	1,90

r	ψ
1,319	-2,30
24	2,50
29	2,55
34	2,40
39	2,10
1,344	1,40
49	0,70
54	+0,25
59	1,00
64	1,70
1,369	2,20
74	2,60
79	2,80
84	2,90
89	2,82
1,394	2,55
99	2,25
1,401	1,75
09	1,30
14	0,60
1,419	0,00
24	-0,60
29	1,20
34	1,75
39	2,20
1,444	2,70
49	3,10
54	3,40
59	3,60
64	3,80
1,469	3,90
74	3,95
79	3,98
84	3,95
89	3,93
1,494	3,82
99	3,70
1,504	3,50
09	3,30
14	3,10
1,519	2,85
24	2,60
29	2,40
34	2,20
39	2,00

v = 13 (suite)

r	ψ
1,544	-1,82
49	1,60
54	1,40
59	1,25
64	1,10
1,569	0,95
74	0,80
79	0,70
84	0,60
89	0,50
1,594	0,40
99	0,30
1,604	0,20
09	0,10

v = 14

r	ψ
0,856	+0,20
61	0,27
66	0,38
71	0,45
76	0,60
0,881	0,75
86	0,90
91	1,10
96	1,35
0,901	1,65
0,906	1,90
11	2,10
16	2,35
21	2,60
26	2,68
0,931	2,63
36	2,35
41	1,90
46	1,10
51	0,10
0,956	-0,80
61	1,60
66	1,90
71	2,10
76	1,85
0,981	1,10
86	0,10
91	+0,90
96	1,60
1,001	1,85
1,006	1,85
11	1,55
16	0,80
21	-0,30
26	1,20
1,031	1,80
36	1,85
41	1,60
46	0,70
51	+0,40
1,056	1,25
61	1,80
66	1,85
71	1,65
76	0,70
1,081	-0,20
86	1,20
91	1,75
96	1,85
1,101	1,55
1,106	0,70
11	+0,20
16	1,15
21	1,75
26	1,90
1,131	1,75
36	1,00
41	0,20
46	-0,75
51	1,60
1,156	1,95
61	1,85
66	1,30
71	0,40
76	+0,60
1,181	1,45
86	1,90
91	2,02
96	1,80
1,201	1,30
1,206	0,40
11	-0,60
16	1,50
21	2,00
26	2,10
1,231	1,90
36	1,30
41	0,40
46	+0,50
51	1,30
1,256	1,90
61	2,20
66	2,25
71	2,05
76	1,35
1,281	0,60
86	-0,40
91	1,20
96	1,90
1,301	2,25
1,306	-2,40
11	2,30
16	1,80
21	1,30
26	0,40
1,331	+0,35
36	1,20
41	1,75
46	2,35
51	2,60
1,356	2,68
61	2,62
66	2,35
71	1,80
76	1,10
1,381	0,30
86	-0,60
91	1,20
96	2,00
1,401	2,40
1,406	2,75
11	2,95
16	3,05
21	3,00
26	2,80
1,431	2,50
36	1,90
41	1,45
46	0,85
51	0,20
1,456	+0,50
61	1,00
66	1,70
71	2,15
76	2,70
1,481	3,00
86	3,40
91	3,60
96	3,80
1,501	3,90
1,506	3,95
11	4,00
16	3,96
21	3,94
26	3,90

v = 14 (suite)

r	Ψ
1,531	+3,80
36	3,60
41	3,40
46	3,15
51	2,90
1,556	2,70
61	2,50
66	2,30
71	2,10
76	1,80
1,581	1,60
86	1,45
91	1,30
96	1,15
1,601	1,00
1,606	0,90
11	0,80
16	0,70
21	0,60
26	0,50
1,631	0,40
36	0,30
41	0,20
46	0,10

v = 15

r	Ψ
0,852	+0,20
57	0,30
62	0,37
67	0,45
72	0,55
0,877	0,65
82	0,80
87	1,05
92	1,35
97	1,60
0,902	1,85
07	2,05
12	2,35
17	2,52
22	2,60
0,927	2,50
32	2,10
37	1,45
42	0,60
47	-0,40
0,952	1,20
57	1,80
62	2,05
67	2,05
72	1,75
0,977	0,90
82	+0,10
87	1,10
92	1,65
97	1,90
1,002	1,80
07	1,20
12	0,20
17	-0,75
22	1,50
1,027	1,85
32	1,82
37	1,45
42	0,40
47	+0,60
1,052	1,40
57	1,75
62	1,70
67	1,20
72	0,10

r	Ψ
1,077	-0,80
82	1,60
87	1,85
92	1,75
97	1,30
1,102	0,30
07	+0,70
12	1,50
17	1,80
22	1,70
1,127	1,10
32	0,00
37	-0,90
42	1,60
47	1,90
1,152	1,85
57	1,40
62	0,80
67	+0,40
72	1,30
1,177	1,80
82	1,90
87	1,60
92	0,70
97	-0,10
1,202	1,10
07	1,70
12	2,05
17	2,00
22	1,70
1,227	0,85
32	+0,30
37	1,10
42	1,80
47	2,05
1,252	2,05
57	1,70
62	0,90
67	0,00
72	-0,90
1,277	1,50
82	2,00
87	2,25
92	2,25
97	2,10

r	Ψ
1,302	-1,50
07	0,70
12	+0,10
17	1,00
22	1,80
1,327	2,15
32	2,40
37	2,37
42	2,10
47	1,60
1,352	0,80
57	0,00
62	-0,80
67	1,55
72	2,10
1,377	2,45
82	2,70
87	2,73
92	2,63
97	2,40
1,402	1,80
07	1,10
12	0,35
17	+0,35
22	1,15
1,427	1,70
32	2,30
37	2,60
42	2,90
47	3,00
1,452	-2,98
57	2,85
62	2,55
67	2,10
72	1,50
1,477	1,00
82	0,30
87	-0,30
92	1,10
97	1,60
1,502	2,15
07	2,65
12	3,10
17	3,40
22	3,65

v = 15 (suite)

r	ψ
1,527	-3,90
32	4,05
37	4,17
42	4,20
47	4,22
1,552	4,20
57	4,17
62	4,10
67	3,90
72	3,70
1,577	3,50
82	3,30
87	3,30
92	2,70
97	2,50
1,602	2,25
07	2,00
12	1,85
17	1,70
22	1,55
1,627	1,45
32	1,30
37	1,20
42	1,10
47	1,00
1,652	0,90
57	0,80
62	0,70
67	0,60
72	0,50
1,677	0,40
82	0,30
87	0,20
92	0,10

v = 16

r	ψ
0,848	+0,20
53	0,27
58	0,35
63	0,45
68	0,55
0,873	0,65
78	0,80
83	1,05
88	1,35
93	1,60
0,898	1,90
0,903	2,05
08	2,30
13	2,52
18	2,60
0,923	2,57
28	2,25
33	1,70
38	1,10
43	0,10
0,948	-0,90
53	1,60
58	1,95
63	2,05
68	1,70
0,973	0,90
78	+0,20
83	1,15
88	1,70
93	1,90
0,998	1,75
1,003	1,20
08	0,30
13	-0,70
18	1,50
1,023	1,80
28	1,70
33	1,10
38	0,00
43	+1,00
1,048	1,70
53	1,80
58	1,60
63	0,90
68	-0,30

r	ψ
1,073	1,10
78	1,75
83	1,77
88	1,30
93	0,50
1,098	+0,60
1,103	1,40
08	1,75
13	1,80
18	1,35
1,123	0,50
28	-0,60
33	1,30
38	1,75
43	1,82
1,148	1,40
53	0,50
58	+0,50
63	1,35
68	1,80
1,173	1,90
78	1,70
83	1,00
88	0,00
93	-0,90
1,198	1,60
1,203	1,92
08	1,90
13	1,50
18	0,50
1,223	+0,50
28	1,30
33	1,80
38	2,05
43	2,00
1,248	1,70
53	0,80
58	-0,10
63	1,00
68	1,75
1,273	2,10
78	2,15
83	2,00
88	1,30
93	0,50

r	ψ
1,398	+0,50
1,403	1,20
08	1,80
13	2,20
18	2,30
1,423	2,25
28	1,90
33	1,15
38	0,30
43	-0,60
1,448	1,40
53	2,00
58	2,35
63	2,50
68	2,40
1,473	2,10
78	1,50
83	0,75
88	+0,20
93	0,80
1,498	1,50
1,503	2,05
08	2,55
13	2,70
18	2,75
1,523	2,70
28	2,50
33	1,95
38	1,30
43	0,60
1,548	-0,30
53	0,90
58	1,60
63	2,10
68	2,55
1,573	2,85
78	3,05
83	3,10
88	3,10
93	2,95
1,598	2,70
1,603	2,30
1,608	1,75
13	1,25
18	0,75

v = 16 (suite)

r	Ψ
1,623	-0,10
28	+0,50
33	1,20
38	1,70
43	2,20
1,648	2,60
53	3,10
58	3,40
63	3,70
68	3,90
1,673	4,10
78	4,20
83	4,25
88	4,30
93	4,25
1,698	4,20
1,703	4,15
08	4,00
13	3,90
18	3,60
1,723	3,35
28	3,10
33	2,90
38	2,70
43	2,40
1,748	2,20
53	2,00
58	1,80
63	1,65
68	1,50
1,773	1,35
78	1,20
83	1,05
88	0,90
93	0,80
1,798	0,70
1,803	0,60
08	0,50
13	0,40
18	0,20
1,823	0,10

v = 17

r	Ψ
0,845	+0,10
50	0,20
55	0,30
60	0,40
65	0,50
0,870	0,65
75	0,80
80	1,05
85	1,30
90	1,60
0,895	1,85
0,900	2,10
05	2,40
10	2,55
15	2,58
0,920	2,42
25	1,85
30	1,15
35	0,10
40	-0,85
0,945	1,50
50	2,00
55	2,05
60	1,92
65	1,30
0,970	0,30
75	+0,70
80	1,45
85	1,85
90	1,80
0,995	1,20
1,000	0,10
05	-0,90
10	1,60
15	1,85
1,020	1,75
25	1,10
30	0,20
35	+0,80
40	1,50
1,045	1,75
50	1,55
55	0,65
60	-0,40
65	1,30

r	Ψ
1,070	-1,77
75	1,80
80	1,45
85	0,50
90	+0,40
1,095	1,30
1,100	1,70
1,105	1,70
10	1,20
15	0,10
1,120	-0,90
25	1,65
30	1,85
35	1,80
40	1,20
1,145	0,30
50	+0,70
55	1,50
60	1,80
65	1,75
1,170	1,20
75	0,10
80	-0,80
85	1,65
90	1,98
1,195	1,92
1,200	1,55
05	0,70
10	+0,20
15	1,10
1,220	1,70
25	1,98
30	1,90
35	1,30
40	0,50
1,245	-0,50
50	1,30
55	1,90
60	2,20
65	2,15
1,270	1,85
75	1,10
80	0,20
85	+0,70
90	1,40

r	Ψ
1,295	+2,00
1,300	2,17
05	2,15
10	1,75
15	0,85
1,320	0,10
25	-0,75
30	1,50
35	2,15
40	2,40
1,345	2,50
50	2,37
55	1,90
60	1,30
65	0,50
1,370	+0,35
75	1,20
80	1,75
85	2,25
90	2,50
1,395	2,38
1,400	2,00
05	1,40
10	0,50
15	-0,30
1,420	1,00
25	1,70
30	2,30
35	2,70
40	2,90
1,445	2,95
50	2,85
55	2,58
60	2,05
65	1,50
1,470	0,75
75	0,00
80	+0,70
85	1,30
90	1,95
1,495	2,40
1,500	2,75
05	3,00
10	3,10
15	3,12

v = 17 (suite)

r	ψ	r	ψ
1,520	+3,05	1,845	-0,55
25	2,80	50	0,45
30	2,50	55	0,35
35	2,00	60	0,25
40	1,50	65	0,15
1,545	0,90		
50	0,30		
55	-0,30		
60	1,00		
65	1,50		
1,570	2,00		
75	2,60		
80	3,10		
85	3,40		
90	3,70		
1,695	4,00		
1,700	4,20		
05	4,35		
10	4,45		
15	4,50		
1,720	4,50		
25	4,40		
30	4,25		
35	4,10		
40	3,95		
1,745	3,80		
50	3,60		
55	3,40		
60	3,20		
65	2,95		
1,770	2,70		
75	2,50		
80	2,30		
85	2,10		
90	1,90		
1,795	1,70		
1,800	1,60		
05	1,50		
10	1,35		
15	1,20		
1,820	1,05		
25	0,95		
30	0,85		
35	0,75		
40	0,65		

v = 18

r	ψ	r	ψ
0,842	+0,10	1,067	-1,70
47	0,20	72	1,70
52	0,30	77	1,30
57	0,40	82	0,15
62	0,50	87	+0,80
0,867	0,65	1,092	1,50
72	0,80	97	1,82
77	1,05	1,102	1,05
82	1,30	07	0,00
87	1,60	12	-1,00
0,892	1,90	1,117	1,65
97	2,05	22	1,80
0,902	2,30	27	1,50
07	2,55	32	0,60
12	2,62	37	+0,40
0,917	2,55	1,142	1,30
22	2,20	47	1,70
27	1,60	52	1,80
32	0,80	57	1,60
37	-0,10	62	0,85
0,942	1,00	1,167	-0,20
47	1,70	72	1,10
52	1,95	77	1,75
57	2,00	82	1,90
62	1,50	87	1,60
0,967	0,50	1,192	1,00
72	+0,70	97	+0,15
77	1,40	1,202	0,90
82	1,85	07	1,65
87	1,85	12	2,00
0,992	1,55	1,217	2,00
97	0,70	22	1,70
1,002	-0,30	27	0,90
07	1,20	32	0,00
12	1,75	37	-1,00
1,017	1,75	1,242	1,60
22	1,20	47	2,00
27	0,20	52	2,00
32	+0,85	57	1,50
37	1,60	62	0,80
1,042	1,80	1,267	+0,20
47	1,65	72	1,10
52	0,80	77	1,80
57	-0,10	82	2,12
62	1,20	87	2,15

v = 18 (suite)

r	ψ	r	ψ	r	ψ	r	ψ
1,292	+2,00	1,517	-1,00	1,742	+1,60	0,839	+0,10
97	1,40	22	1,60	47	1,50	44	0,20
1,302	0,50	27	2,15	52	1,40	49	0,30
07	-0,50	32	2,60	57	1,30	54	0,40
12	1,25	37	2,90	62	1,20	59	0,50
1,317	1,90	1,542	3,12	1,767	1,10	0,864	0,65
22	2,20	47	3,20	72	1,00	69	0,80
27	2,25	52	3,20	77	0,90	74	1,05
32	2,05	57	3,10	82	0,80	79	1,30
37	1,35	62	2,85	87	0,70	84	1,55
1,342	0,70	1,567	2,50	1,792	0,60	0,889	+1,85
47	+0,30	72	2,00	97	0,50	94	2,05
52	1,00	77	1,40	1,802	0,40	99	2,30
57	1,70	82	0,85	07	0,30	0,904	2,55
62	2,20	87	0,15	12	0,20	09	2,62
1,367	22,45	1,592	+0,40	1,817	0,10	0,914	2,52
72	2,47	97	1,10			19	2,05
77	2,25	1,602	1,55			24	1,40
82	1,90	07	2,10			29	0,50
87	1,20	12	2,60			34	-0,50
1,392	0,40	1,617	3,10			0,939	1,50
97	-0,50	22	3,40			44	1,90
1,402	1,25	27	3,70			49	2,10
07	2,00	32	3,90			54	2,00
12	2,35	37	4,10			59	1,50
1,417	2,60	1,642	4,20			0,964	0,60
22	2,58	47	4,30			69	+0,60
27	2,45	52	4,33			74	1,40
32	1,95	57	4,35			79	1,85
37	1,30	62	4,34			84	1,82
1,442	0,65	1,667	4,30			0,989	-1,20
47	+0,30	72	4,25			94	0,25
52	0,90	77	4,10			99	-0,80
57	1,65	82	3,95			1,004	1,60
62	2,10	87	3,70			09	1,88
1,467	2,55	1,692	3,55			1,014	1,80
72	2,80	97	3,40			19	1,20
77	2,88	1,702	3,20			24	0,15
82	2,85	07	3,00			29	+0,80
87	2,70	12	2,80			34	1,60
1,492	2,40	1,717	2,60			1,039	1,80
97	1,80	22	2,40			44	1,45
1,502	1,15	27	2,20			49	0,50
07	0,60	32	2,00			54	-0,50
12	-0,20	37	1,80			59	1,40

v = 19

v = 19 (suite)

r	ψ	r	ψ	r	ψ	r	ψ
1,064	-1,82	1,289	+0,80	1,514	-3,00	1,739	-2,55
69	1,75	94	0,00	19	2,82	44	2,25
74	1,20	99	-0,90	24	2,50	49	2,10
79	0,10	1,304	1,70	29	1,90	54	1,90
84	+0,85	09	2,20	34	1,30	59	1,70
1,089	1,60	1,314	2,30	1,539	0,50	1,764	1,50
94	1,80	19	2,20	44	+0,15	69	1,33
99	1,40	24	1,80	49	0,90	74	1,18
1,104	0,50	29	0,90	54	1,60	79	1,05
09	-0,60	34	0,00	59	2,10	84	0,90
1,114	1,45	1,339	+0,90	1,564	2,60	1,789	0,80
19	1,85	44	1,60	69	2,85	94	0,72
24	1,80	49	2,15	74	3,10	99	0,65
29	1,30	54	2,33	79	3,20	1,804	0,58
34	0,25	59	2,32	84	3,17	09	0,50
1,139	+0,85	1,364	2,05	1,589	+3,05	1,814	0,43
44	1,60	69	1,30	94	2,75	19	0,38
49	1,82	74	0,50	99	2,35	24	0,34
54	1,60	79	-0,40	1,604	1,85	29	0,30
59	0,80	84	1,10	09	1,35	34	0,27
1,164	-0,30	1,389	1,80	1,614	0,70	1,839	0,22
69	1,30	94	2,30	19	0,10	44	0,18
74	1,80	99	2,55	24	-0,50	49	0,15
79	1,95	1,404	2,55	29	1,10	54	0,12
84	1,73	09	2,00	34	1,65	59	0,10
1,189	1,00	1,414	1,55	1,639	2,20		
94	0,00	19	0,60	44	2,70		
99	+1,10	24	+0,25	49	3,10		
1,204	1,75	29	1,00	54	3,40		
09	1,95	34	1,25	59	3,70		
1,214	1,75	1,439	2,25	1,664	3,95		
19	1,10	44	2,60	69	4,12		
24	0,00	49	2,67	74	4,25		
29	-1,00	54	2,60	79	4,30		
34	1,65	59	2,30	84	4,32		
1,239	2,05	1,464	1,80	1,689	4,31		
44	2,05	69	1,15	94	4,30		
49	1,80	74	0,30	99	4,20		
54	0,90	79	-0,40	1,704	4,10		
59	0,00	84	1,20	09	3,90		
1,264	+1,00	1,489	1,80	1,714	3,75		
69	1,75	94	2,40	19	3,50		
74	2,10	99	2,70	24	3,30		
79	2,05	1,504	2,95	29	3,05		
84	1,70	09	3,02	34	2,80		

v = 20

r	ψ	r	ψ	r	ψ	r	ψ
0,837	+0,10	1,037	+1,80	1,237	-2,00	1,437	+2,55
42	0,20	42	1,40	42	1,80	42	2,60
47	0,30	47	0,30	47	1,25	47	2,40
52	0,40	52	-0,60	52	0,30	52	2,00
57	0,50	57	1,50	57	+0,70	57	1,20
0,862	0,65	1,062	1,80	1,262	1,50	1,462	0,30
67	0,80	67	1,55	67	1,95	67	-0,50
72	1,05	72	0,65	72	2,10	72	1,35
77	1,30	77	+0,40	77	1,95	77	2,00
82	1,60	82	1,20	82	1,40	82	2,45
0,887	-1,90	1,087	1,70	1,287	-0,40	1,487	2,70
92	2,05	92	1,80	92	-0,50	92	2,80
97	2,30	97	1,40	97	1,40	97	2,70
0,902	2,55	1,102	0,50	1,302	2,00	1,502	2,40
07	2,62	07	-0,80	07	2,20	07	1,90
0,912	2,60	1,112	1,55	1,312	2,10	1,512	1,20
17	2,25	17	1,80	17	1,60	17	0,50
22	1,60	22	1,65	22	0,90	22	+0,25
27	0,80	27	0,80	27	+0,15	27	1,00
32	-0,15	32	+0,20	32	0,90	32	1,60
0,937	1,10	1,137	1,00	1,337	1,65	1,537	2,15
42	1,80	42	1,65	42	2,10	42	2,60
47	2,05	47	1,85	47	2,30	47	2,85
52	2,00	52	1,65	52	2,25	52	3,00
57	1,40	57	0,90	57	1,90	57	3,00
0,962	0,30	1,162	-0,02	1,362	1,20	1,562	2,90
67	+0,80	67	1,30	67	0,20	67	2,60
72	1,55	72	1,85	72	-0,70	72	2,00
77	1,90	77	1,85	77	1,60	77	1,35
82	1,85	82	1,45	82	2,00	82	0,65
0,987	1,30	1,187	0,40	1,387	2,40	1,587	-0,20
92	0,40	92	+0,60	92	2,45	92	0,85
97	-0,70	97	1,50	97	2,30	97	1,60
1,002	1,50	1,202	1,88	1,402	1,80	1,602	2,20
07	1,80	07	1,95	07	1,10	07	2,75
1,112	1,70	1,212	1,70	1,412	0,30	1,612	3,05
17	0,90	17	0,90	17	+0,60	17	3,25
22	+0,10	22	-0,20	22	1,30	22	3,40
27	1,15	27	1,20	27	2,00	27	3,45
32	1,70	32	1,80	32	2,40	32	3,35

v = 20 (suite)

r	ψ	r	ψ'
1,637	-3,15	1,837	+1,10
42	2,85	42	0,95
47	2,35	47	0,80
52	1,90	52	0,70
57	1,30	57	0,60
1,662	0,70	1,862	0,50
67	0,15	67	0,40
72	+0,45	72	0,30
77	1,00	77	0,20
82	1,60	82	0,10
1,687	2,10		
92	2,60		
97	3,00		
1,702	3,40		
07	3,70		
1,712	3,95		
17	4,15		
22	4,35		
27	4,45		
32	4,50		
1,737	-4,47		
42	4,40		
47	4,33		
52	4,20		
57	4,10		
1,762	3,95		
67	3,70		
72	3,50		
77	3,25		
82	3,10		
1,787	2,95		
92	2,75		
97	2,55		
1,802	2,35		
07	2,15		
1,812	1,95		
17	1,75		
22	1,55		
27	1,40		
32	1,25		

C H A P I T R E IV

-:-:-:-:-:-:-:-

NOUVELLE METHODE POUR LE CALCUL DES VALEURS INITIALES

Une grande difficulté dans ce travail réside dans le calcul des valeurs initiales. Ce calcul rendu possible par la méthode exposée dans le chapitre I reste néanmoins pénible surtout pour les hauts niveaux.

Il s'agit de calculer :

$$\frac{\varphi'}{\varphi} = a\left[\frac{z-b}{2} - z\,\frac{L'}{L}\right]$$

c'est-à-dire plus spécifiquement la quantité $\varphi = z\,\frac{L'}{L}$, pour la valeur z_o correspondante au point initial P.

Nous avons signalé que le calcul direct de L_v^b et $L'_v{}^b$ (dans ce cas) reste interdit aux calculateurs électroniques ordinaires vu les valeurs élevées de z et de b.

Nous avons trouvé une méthode permettant de calculer φ par les calculateurs électroniques mais les moyens techniques dont nous disposons ne nous permettent pas d'effectuer ce calcul. La méthode proposée reste d'un grand intérêt pour tout calcul semblable.

1. - Méthode proposée. - Nous avons remarqué qu'en dépit des très grandes valeurs que peuvent atteindre les polynômes de Laguerre, la quantité $\varphi = z\,\frac{L'}{L}$ ne dépasse jamais quelques dizaines.

Reprenons l'équation :

$$zL'' + (b + 1 - z)L' + vL = 0 \qquad (2)$$

dont la solution est : $L_v^b(z)$. Faisons la transformation :

$$\varphi = z\,\frac{L'}{L}$$

$$\varphi' = z\,\frac{L''}{L} - z\,\frac{L'^2}{L^2} + \frac{L'}{L}$$

Divisons les deux membres de l'équation (2) par L et remplaçons $\frac{L'}{L}$ et $\frac{L''}{L}$ par leurs valeurs en fonctions de φ , φ' et z. Nous trouvons :

$$\varphi' + \frac{\varphi^2}{z} + \frac{b - z}{z}\varphi + v = 0 \qquad (6)$$

Pour résoudre l'équation (6) par un calculateur électronique, il faut connaître des valeurs initiales φ_o et φ'_o.

2. - Détermination de φ_o et de φ_o.- Reprenons l'équation (2). Nous demandons à la machine de la résoudre pour une petite valeur de z, z = 2 par exemple.

Les valeurs initiales nécessaires à la résolution de l'équation (2) sont données par :

$$z = 0$$

$$L_v^b(0) = \binom{b+v}{v}$$

$$L'^b_v(0) = -L^{b+1}_{v-1}(0) = -\binom{b+v}{v-1}$$

$$L''^b_v(0) = L^{b+2}_{v-2}(0) = \binom{b+v}{v-z}$$

Avec ces valeurs initiales, la machine résout l'équation (2) et calcule :

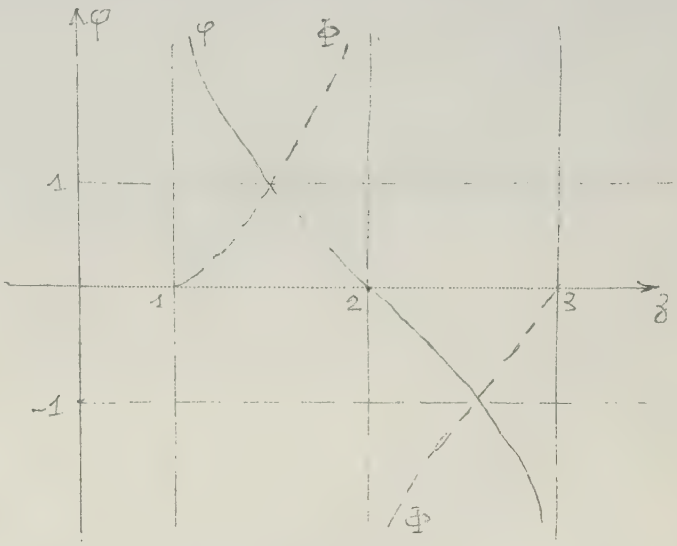
$$\varphi_o = \varphi(2) = 2 \cdot \frac{L'(2)}{L(2)} \quad \text{et} \quad \varphi'_o$$

3. - Résolution de l'équation (6).- Théoriquement la résolution de l'équation (6) est devenue possible pour n'importe quelle valeur de z. Il suffit de choisir l'une des méthodes de calcul numérique connues (Voir [12]), de choisir un pas h de la variable et de passer de $z = 2$ à $z = K + \sqrt{K^2 - b^2}$, abscisse du point d'inflexion P.

Une difficulté provient de la forme de la fonction φ. A part la racine évidente $z = 0$, φ est alternativement nulle et infinie, respectivement pour les zéro de L'^{b}_{v} et de L^{b}_{v}. Il est en effet impossible d'interpoler des branches discontinues.

Pour tourner cette difficulté, nous nous proposons, au voisinage de chaque asymptote de φ, de passer de la fonction φ à sa fonction inverse $\Phi = \frac{1}{\varphi}$ solution de l'équation :

$$(3) \quad -\Phi' + v\Phi^2 + \frac{b-z}{z}\Phi + \frac{1}{z} = 0$$



1 et 3 sont des zéros de L.
2 est un zéro de L'

fig. 11

Dans la région où φ φ devient assez grande nous calculons Φ. Quand Φ touche sa propre région de discontinuité (φ s'approche d'un zéro) nous revenons à φ, et ainsi de suite.

Pratiquement, il suffit de se donner une constante h convenablement choisie (dans la figure : $h = 1$) et en progressant avec z de demander à chaque pas à la machine si $\varphi = h$, si non nous faisons un pas de plus. Si oui, nous

passons à Φ et à l'équation (3). De nouveau à chaque pas nous demandons à la machine si $\Phi = \frac{1}{h}$ et nous traitons Φ comme φ .

Ce calcul étant fait pour un état électronique et un niveau de vibration donnés, deux itérations deviennent nécessaires pour les autres états et les autres niveaux à étudier.

C H A P I T R E V

-:-:-:-:-:-:-:-

PREMIERE EXPLOITATION DES RESULTATS

1. - Calcul des centroïdes. - Jarmain et Nicholls [6] et [14] ont calculé numériquement pour les deux premiers systèmes de bandes de N_2 les valeurs des intégrales :

$$(v', rv'') = \int_0^\infty \Psi_{v'} \, r \, \Psi_{v''} \, dr.$$

$$(v', r^2v'') = \int_0^\infty \Psi_{v'} r^2 \Psi_{v''} \, dr.$$

où $\Psi_{v'}$ et $\Psi_{v''}$ sont les fonctions d'onde de vibration des états électroniques entre lesquels se produit la transition ; v' et v" sont respectivement les nombres quantiques de vibration de l'état supérieur et de l'état inférieur.

Jarmain a remarqué que ces intégrales jouissent de la propriété suivante :

$$\frac{(v', rv'')}{(v', v'')} = \frac{(v', r^2v'')}{(v', rv'')}$$

A partir de ces intégrales une quantité $r_{v',v''}$ est définie par :

$$r_{v',v''} = \frac{(v', rv'')}{(v', v'')}$$

Elle peut être considérée comme étant la moyenne de r pour la transition (v' $\longrightarrow$ v"). Elle est appelée r-centroïd.

Nous appelons :

$$r_1 = \frac{(v', rv")}{(v', v")} \quad \text{et} \quad r_2 = \frac{(v', r^2v")}{(v', rv")}$$

et nous établissons dans le tableau IV des valeurs de r_1 et de r_2 calculées à partir de nos courbes.

Nous constatons que la relation $r_1 = r_2$ est satisfaite pour les transitions $B\Sigma \longrightarrow X\Sigma$ correspondantes aux valeurs de v' et de v" inférieures à 6.

TABLEAU IV

v' → v"		$r_1 = \frac{(v', rv")}{(v', v")}$	$r_2 = \frac{(v', r^2v")}{(v', rv")}$
0	0	1061	1061
0	1	1036,4	1036,4
1	1	1035,3	1035,5
1	2	1030,75	1030,65
0	3	1033,2	1033,1
1	3	981,1	979,2
2	1	1027,5	1028,1
2	2	1025,5	1014,2
3	1	1031,7	1031,9
3	2	1026,6	1029,25
3	3	1010,5	1004,5
3	4	999,7	999,7
3	6	990,8	997,1
4	1	1046,25	1011,8
4	2	1026,2	1026,2
4	4	1006,5	1006,25
5	4	1000,8	1000,7

2. - Normalisation des fonctions d'onde. - Nous avons vu dans le chapitre I que les fonctions d'onde de vibration Ψ_v sont fonctions de la seule variable réelle r. Le facteur de normalisation N_v d'une fonction d'onde Ψ_v est donné par la relation [15] :

$$N_v^2 \int_0^\infty |\Psi_v|^2 \, dr = 1$$

Le calcul de N_v a été effectué pour toutes les fonctions d'onde tracées. Nous dressons dans le tableau V les valeurs calculées de N_v pour les deux états électroniques étudiés. Il faut noter ici que la précision des tracés des fonctions d'onde étant de l'ordre de $5 \cdot 10^{-2}$, la précision du N_v calculé est de l'ordre de $6 \cdot 10^{-2}$ compte tenu de l'imprécision dans le calcul de l'intégrale.

TABLEAU V

v	$N_v(X^2\Sigma_g^+)$	$N_v(B^2\Sigma_u^+)$
0	1,14	1,16
1	0,97	1,00
2	0,94	0,94
3	0,91	0,89
4	0,88	0,86
5	0,84	0,84
6	0,82	0,81
7	0,79	0,78
8	0,78	0,76
9	0,77	0,72
10	0,76	0,68
11	0,75	0,66
12	0,74	0,64
13	0,73	0,62
14	0,72	0,60
15	0,71	0,58
16	0,70	0,56
17	0,69	0,53
18	0,68	0,51
19	0,665	0,50
20		0,49

C O N C L U S I O N

-:-:-:-:-:-:-:-

Nous avons tracé les fonctions d'onde de vibration des niveaux allant de 0 à 19 pour l'état $X^2\Sigma_g^+$ et les fonctions d'onde des niveaux allant de 0 à 20 pour l'état $B^2\Sigma_u^+$ de la molécule N_2^+.

Les courbes obtenues sont d'une grande utilité pour l'étude des états électroniques considérés et de la transition entre ces états.

La méthode de l'enregistrement à l'aide de la machine analogique permet en outre de corriger la courbe de potentiel quand on possède les termes spectraux. Elle a permis d'affirmer la validité du tracé des courbes de potentiel des états $X^2\Sigma_g^+$ et $B^2\Sigma_u^+$ de la molécule N_2^+ élaboré par R. Grandmontagne et R. Eido.

-:-:-:-:-:-:-:-

BIBLIOGRAPHIE

1 - M. DANLOUX DUMESNILS : Le calcul analogique par courants continus. - Ed. Dunod, Paris (1958)

2 - J. D'INCAN : Thèse, Lyon (1959)

3 - R. EIDO : Thèse 3me Cycle, Lyon (1959)

4 - R. EIDO : Cah. Phys. 15 (1961), 382

5 - A. ERDELYI ; W. MAGNUS ; F. OBERHETTINGER ; F.G. TRICOMI : Higher transcendental Functions ; Vol. 1 Mc Graw-Hill Co Inc, New-York (1953)

6 - P.A. FRASER : Canad. J. of Phys. 32 (1954), 515

7 - R. GRANDMONTAGNE : Cr. A. Sc. 244 (1957), 2586

8 - R. GRANDMONTAGNE : Jl. Phys. 8 . 19 (1958), 151

9 - R. GRANDMONTAGNE : Cah. Phys. 15 (1961), 385

10 - R. GRANDMONTAGNE ; R. EIDO : Cr. A. Sc. 249 (1959), 366

11 - G. HERZBERG : Spectra of diatomic Molecules, Van Nostrand Company, (1955)

12 - W.E. MILNE : Numerical solutions of differential equations J. Wiley and Sons Inc. New York (1957)

13 - P. MORSE : Phys. Rev. 34 (1929), 57

14 - R.W. NICHOLLS ; W.R. JARMAIN : Proc. Phys. Soc. A 69 (1953), 253

15 - P. PLUVINAGE : Eléments de mécanique quantique, éd. Masson Paris (1955)

16 - L.A. YOUNG ; G.E. UHLENBECK : Phys. Rev. 36 (1930), 1154.

Vu :

Les Membres du Jury :

MM. JANIN
GRANDMONTAGNE
LAFORGUE

Vu et approuvé :
Pour le Doyen de la Faculté des Sciences
L'Assesseur ,

J. BRACONNIER.

Vu et accordé le permis d'imprimer :

Lyon, le 19 juin 1962

Le Recteur :

P. LOUIS.